

1. Raport științific si tehnic

Cuprins

- 2.1. Obiective generale
- 2.2 Obiectivele fazei de execuție
- 2.3 Rezumatul fazei
- 2.4 Descrierea științifică și tehnică
- Concluzii
- Bibliografie

2.1 Obiective generale

- Obiectivul principal al proiectului constă în dezvoltarea expertizei și pregătirea de experimente pentru infrastructura ELI-NP,
- Studiul generării de radiație de particule accelerate cu laserul și a interacției acestora cu semiconductori și cristale de fluorură cu aplicații la celule solare, dispozitive electronice și detectori optici. Aceste teme sunt legate de temele 5.6.15 (Cercetare în domeniul științei materialelor în câmpuri cu radiație de intensitate mare) și 5.2.7 (Modelarea interacției laserilor de intensitate mare cu materia) din Cartea Albă a ELI-NP.

2.2 Obiectivele fazei de execuție

- O1: Proiectarea experimentelor de iradiere a cristalelor
 - A1.1 Definirea de experimente de iradiere a materiei condensate pentru Memoriul Tehnic (Technical Design Report) al ELI-NP
 - A1.2 Proiectarea unei instalații experimentale pentru iradierea materialelor cu particule accelerate cu laserul
- O2: Investigarea efectelor radiației asupra unor cristale de fluorură dopate cu pământuri rare
 - A2.1 Creșterea de cristale de BaF_2 dopate cu diverse concentrații de YbF_3
 - A2.2 Creșterea de cristale de CaF_2 dopate cu diverse concentrații de YbF_3
- O4: Modelarea numerică a radiației de electroni și protoni accelerați prin interacțiunea laser cu o țintă subțire
 - A4.1 Evaluarea programelor de simulare existente, bazate pe metoda PIC (Particle In Cell), pentru accelerarea de particule ca urmare a interacțiunii laser-țintă subțire

2.3 Rezumatul fazei (max 2 pagini)

Datorită progreselor recente în domeniul tehnologiilor laser, au fost atinse energii și intensități ale fasciculului tot mai mari, deschizând astfel calea pentru a studia și exploata fenomene noi, cum ar fi cele care decurg din interacțiunea radiației laser de mare intensitate cu plasmă reci cu densitate ridicată. În literatura de specialitate, acest fenomen este cunoscut sub numele de accelerarea plasmă cu laserul (APL).

Studierea fasciculelor de particule accelerate prin mecanismul APL prezintă interes datorită asemănării lor cu fasciculele de radiație cosmică, motiv pentru care ar putea fi utile pentru testarea dispozitivelor electro-optice destinate aplicațiilor spațiale. Obiectivul acestei faze este de a pregăti experimente fizice și numerice pentru infrastructura CETAL, în scopul studierii generării radiației de particule prin mecanismul ACL și studierii interacțiunii acestora cu diferite cristale de CaF_2 , BaF_2 și cu diferite celule solare destinate aplicațiilor spațiale.

A1.1 Definirea de experimente de iradiere a materiei condensate pentru Memoriul Tehnic (Technical Design Report) al ELI-NP

Am realizat două propuneri pentru Memoriul Tehnic (Technical Design Report) al ELI-NP "Materiale în medii extreme pentru aplicații energetice, de acceleratoare și spațiale la ELI-NP" :

1. Degradarea cristalelor optice și a celulelor solare în spațiu

Spectrul energetic al particulelor accelerate cu laserul este similar cu cel heteroenergetic al radiației cosmice, spre deosebire de cel quasi-monoenergetic al fasciculelor de particule obținute în acceleratoare clasice. La ELI-NP va fi obținută cea mai ridicată fluență a radiației generate prin mecanismul APL din lume. Astfel, propunem folosirea infrastructurii ELI-NP pentru testarea accelerată a degradării cristalelor optice și a celulelor solare în condiții de iradiere similare cu cele din spațiul cosmic. Dincolo de experimentele științifice, această activitate ar putea fi considerată ca un serviciu de testare pe care ELI-NP ar putea să-l ofere fabricanților de celule solare spațiale.

2. Iradierea cristalelor dopate de fluoruri pentru studii fundamentale asupra modificării proprietăților optice. Scopul este utilizarea radiației generate prin mecanismul APL la ELI-NP pentru a studia schimbarea proprietăților optice și dielectrice a materialelor cristaline iradiate pentru noi posibile aplicații laser. Un aspect foarte important al folosirii mecanismului APL pentru studiul defectelor optice induse în cristale prin radiație constă în disponibilitatea unei surse ieftine și ușor reglabile de protoni, în comparație cu costurile ridicate pe care le implică acceleratoarele clasice de protoni. De asemenea, conversia de sarcină din Yb^{3+} în Yb^{2+} ar putea fi realizată rapid datorită dozei mari de radiație per puls obținute prin mecanismul APL la ELI-NP, cu scopul îmbunătățirii intensității emisiei în UV a Yb^{2+} , care poate fi utilizat în laseri medicali pentru tratamentul psoriazisului.

A1.2 Proiectarea unei instalații experimentale pentru iradierea materialelor cu particule accelerate cu laserul

Montajul experimental pentru iradierea cu particule generate prin mecanismul ALP a probelor cristaline și a celulelor solare a fost proiectat pentru a fi integrat în interiorul camerei de interacțiune a laserului de la infrastructura CETAL. Montajul

experimental include două stagii de translație pentru poziționarea probelor experimentale în fața ferestrei colimatorului și pentru reglarea fluenței radiației de particule. Montajul este schițat în cinci planșe de execuție care conțin detaliile de realizare. Un fișier .dwg pentru vizualizarea 3D, care poate fi importat în proiectul camerei de interacție laser de la CETAL, a fost de asemenea realizat.

2.1 Creșterea de cristale de BaF₂ dopate cu diverse concentrații de YbF₃

Pentru a investiga efectele radiației cosmice asupra critsalelor de fluorură de bariu dopate cu yterbiu, au fost realizate 9 experimente de creștere cu ajutorul unei instalații de tip Bridgman. Experimentele au constat în identificarea condițiilor optime de creștere a critsalelor de BaF₂: un gradient de temperatură în zona caldă între 10-15 K/cm, menținerea în zona adiabatică a unei temperaturi de solidificare în jurul valorii de 1654 K și un gradient de temperatură în zona rece în jurul valorii de 16 K/cm. Pentru îndepărtarea oxigenului din rețeaua cristalină, o concentrație de 4% PbF₂ a fost adăugată sarjei de materiei primă de BaF₂. Ciclul mediu de creștere a durat 56 de ore. Diferite concentrații de YbF₃ (între 0.05 și 0.2 mol%) au fost folosite pentru obținerea cristalelor de BaF₂ dopate cu yterbiu.

A2.2. Creșterea de cristale de CaF₂ dopate cu diverse concentrații de YbF₃

Cinci cristale de fluorură de calciu dopate cu yterbiu au fost crescute utilizând metoda Bridgman. Concentrațiile de YbF₃ folosite pentru doparea cristalelor au variat între 0.07 și 1.61 mol%. A fost folosită o concentrație mai mare de zterbiu la creșterea cristalelor de florură de calciu, datorită grupării yterbiului în grupări de tip hexamer. Astfel de grupări introduc nivele electronice metastabile utile unor aplicații laser.

Probe clivate din toate cristalele de BaF₂ și CaF₂ vor fi caracterizate din punct de vedere al proprietăților optice, dielectrice și structurale, atât înainte cât și după iradierea cu particule obținute prin mecanismul APL, la infrastructura CETAL.

A4.1 Evaluarea programelor de simulare existente, bazate pe metoda PIC (Particle In Cell), pentru accelerarea de particule ca urmare a interacțiunii laser-țintă subțire

Metoda PIC este utilizată pe larg pentru a modela sisteme cu un număr mare de particule cu sarcină electrică în câmpul lor electromagnetic self/auto-consistent. În urma evaluării câtorva instrumente software (Vsim, OSIRIS, QUICKPIC, VLPL, OOPIC, PICLS) am concluzionat că cel mai bun cod numeric de tip PIC pentru nevoile noastre curente este software-ul PICLS. Am ales acest cod datorită mai multor motive. Astfel, codul are un fundament teoretic bazat pe simulări ale plasmei, și a fost optimizat pentru simulări numerice ale interacției laser-plasmă. Codul sursă este în mod curent optimizat la "Université de Bordeaux" și este disponibil pentru utilizare și editare. Un alt motiv important pentru alegerea acestui soft constă în disponibilitatea dezvoltatorilor de a corespunda cu grupul nostru în vederea implementării codului.

Pentru a ajunge la o înțelegere adecvată a fenomenelor fizice, modelarea numerică trebuie efectuată pe supercomputere. Astfel, software-ul PICLS2D a fost compilat pe supercomputerul BlueGene de la Centrul HPC de la Universitatea de Vest din Timișoara. Au fost făcute rulări preliminare pentru a studia influența grosimii țintei asupra câmpului electric și asupra energiilor protonilor. S-a constatat că intensitatea câmpului electric datorat pulsului laser este mai mare în interiorul țintelor și că pentru ținte mai subțiri electronii au viteze mai ridicate, iar pentru ținte mai groase domină protonii de energii

mai scăzute. Acest fapt arată că pentru a obține protoni de o anumită energie, trebuie aleasă o țintă cu o grosime corespunzătoare.

2.4 Descrierea științifică și tehnică

A1.1 Definirea de experimente de iradiere a materiei condensate pentru Memoriul Tehnic (Technical Design Report) al ELI-NP

Au fost definite două experimente de iradiere a materiei condensate pentru Memoriul Tehnic (TDR) al ELI-NP: (1) *Degradarea cristalelor optice și a celulelor solare în spațiu* și (2) *Iradierea cristalelor dopate de fluoruri pentru studii fundamentale asupra modificării proprietăților optice*. Așa cum se solicită pentru TDR, propunerile au fost redactate în limba engleză și sunt inserate integral în Anexa 1.

În cele ce urmează, cele două propuneri sunt prezentate în detaliu.

Degradarea cristalelor optice și a celulelor solare în spațiu

Obiective. Utilizarea facilităților ELI-NP pentru testarea accelerată a degradării calității cristalelor optice și a performanței celulelor solare în condiții de iradiere cu particule similare cu cele din spațiu. Dincolo de experimentele științifice, activitatea poate fi imaginată ca un serviciu de testare pe care ELI-NP îl poate oferi fabricanților de componente optice sau celule solare destinate a fi utilizate în spațiu.

Fundament fizic. Având în vedere costul ridicat al experimentării directe în spațiu, efectele radiațiilor cosmice asupra materiei condensate pot fi evaluate în experimente la sol. Facilitățile oferite de ELI-NP îl recomandă ca un candidat important, în principal pentru că laserele de mare putere ar putea fi o alternativă mai bună pentru a reproduce în laborator interacțiunea dintre radiația cosmică și materia condensată. Spre deosebire de spectru cvasi-monoenergetic al fasciculului de particule din acceleratoarele liniare, spectrul energetic al unui fascicul de particule accelerate cu laserul este similar cu spectrul radiației cosmice naturale [1]. În ultimii ani, la Universitatea de Vest din Timișoara, grupul creștere a cristalelor a dobândit o experiență importantă în domeniul creșterii și caracterizării cristalelor de tip fluorură dopate cu pământuri rare [2, 3]. De asemenea, Laboratorul Fotovoltaic a dobândit expertiză în monitorizarea, estimarea și prognoza funcționării sistemelor fotovoltaice (<http://solar.physcis.uvt.ro>). Prin urmare, un experiment interesant care poate fi derulat pe platforma ELI-NP constă în studierea efectului radiațiilor cosmice asupra celulelor solare și cristalelor de fluorură de calciu și fluorură de bariu.

Fluorura de calciu (CaF₂) este un material optic cu calități deosebite. Pe lângă faptul că foarte transparentă în regiunea UVC, CaF₂ are o stabilitate excelentă în timpul exploatării. Mai mult decât atât, CaF₂ este un cristal transparent într-o plajă largă de lungimi de undă de la 140 nm la 7,5 μm, are un indice de refracție mic, ceea ce elimină necesitatea acoperirii cu un strat antireflex. Prin urmare, CaF₂ este un material ideal pentru a fi utilizat ca fereastră optică la spectrofotometre. Lentile optice din CaF₂ sunt folosite de către NASA în multe aplicații [4]. De asemenea, prismele din CaF₂ (grisms)

au fost folosite cu succes în aparatul foto NICMOS de la bordul HST [5]. Cristalul de fluorură de bariu (BaF₂) are aplicații ca fereastră optică într-un interval lat de lungimi de undă și ca scintilator rapid implicând emisia la 195 nm și 220 nm, care este independentă de temperatură în jurul a 300K [6]. De asemenea poate fi solosit pentru detectarea radiației X, gamma sau a altor particule de mare energie. Deoarece BaF₂ este unul dintre cele mai rapide scintilatoare cunoscute, aceasta poate fi folosit în dispozitive de detecție a radiațiilor în spațiul cosmic. Deteriorarea cristalului de BaF₂ este cauzat de formarea de centri de culoare, care provoacă o auto-absorbție a luminii de scintilație [7]. Din acest motiv, este important să se investigheze modul în care expunerea la radiații cosmice influențează structura defectelor și proprietățile optice ale unor astfel de fluoruri, având în vedere utilizarea lor la fabricarea de componente optice pentru sateliți. De notat că, la Laboratorul de creștere a cristalelor de la Universitatea de Vest din Timișoara pot fi obținute cristale optice de CaF₂ și BaF₂ de o foarte bună calitate.

Pe de altă parte, generatorul solar este singura parte a unui satelit la care dispozitivele semiconductoare active sunt expuse direct la radiația din spațiu având numai o protecție minimală. Modul în care mediul extraterestru influențează degradarea dispozitivelor depinde de altitudinea și înclinarea orbitei satelitului (orbitele principale a sateliților sunt cea geostaționară (GEO-36 000 km) și orbita joasă (LEO-câteva sute km altitudine cu diverse înclinări).

Așa cum este evidențiat în versiunea curentă a TDR (capitolul 2.3), electronii și protonii capturați de câmpul magnetic al pământului au cea mai mare contribuție la degradarea celulelor solare în spațiu. Parametrul principal în selectarea unei celule solare pentru a funcționa în spațiu este puterea de ieșire la sfârșitul vieții (EOL – end-of-life). Există o varietate mare de dispozitive și materiale în curs de dezvoltare la nivel mondial: celule solare bazate pe compuși III-V GaAs pe Ge mono, dispozitive duale sau cu trei joncțiuni (de exemplu, [8]). În prezent, eficiența celulelor solare spațiale comerciale este de peste 30% și de peste 44% în laborator [9]. Ca exemplu de degradare a celulelor solare în spațiu, în tabelul de mai jos este prezentată o comparație pentru a performanțelor a trei tipuri de celule solare comerciale: siliciu de înaltă eficiență, joncțiune duală (2J) și joncțiune triplă (3J) celule solare spațiale comerciale reglementate de peliculă de sticlă subțire [10].

Solar Cell Technology	Kg/m ²	η (%)		
		BOL	EOL GEO	EOL LEO
High-Efficiency Si	0.23	17.0	12.5	10.6
2J InGaP/GaAs-on-Ge	0.85	23.5	20.0	18.1
3J InGaP/GaAs/Ge-on-Ge	0.85	26.0	22.6	20.3

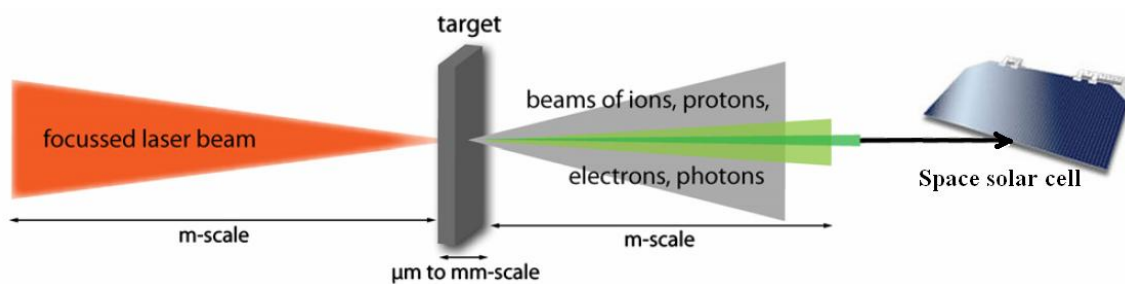
GEO Conditions (60°C) – 1-MeV, 5E14 e/cm²

LEO Conditions (80°C) – 1-MeV, 1E15 e/cm²

Există două abordări principale pentru evaluarea degradării celulelor solare în spațiu [11]: (1) US Jet Propulsion Laboratory (JPL). Scopul acestei metode constă în

determinarea fluenței de electroni cu energia de 1 MeV care produce același nivel de deteriorare a celulei ca în condiții specificate din spațiu. (2) US Naval Research Laboratory (NRL). Esența acestei metode constă în calculul dozei într-o anumită misiune folosind folosind coeficienți spectrali de deteriorare daune.

3. *Propunerea tehnică.* Radiația din spațiu are un spectru energetic exponențial, deoarece mecanismele de accelerație produc distribuții care urmează legile statistice. Acest spectru nu este ușor de a fi reprodus folosind acceleratoare liniare standard, care, din cauza funcționării pe baza rezonanței produc distribuții aproape mono-energetice. Astfel de acceleratoare liniare sunt utilizate în prezent pentru testarea eficienței celulelor solare la EOL [1]. Intrucât la ELI-NP va fi obținută cea mai mare fluență APL din lume, propunem utilizarea acestei facilități pentru testarea accelerată a degradării cristalelor optice (studiul defectelor structurale, eficienței luminiscentei) și a celulelor solare (eficiența de conversie) în condiții de iradiere asemănătoare cu cele din spațiu. Alternativa propusă este schițată în figura de mai jos.



Schița unui dispozitiv APL. Un puls laser de mare putere este focalizat asupra unei ținte. Electronii sunt antrnați în mișcare de către câmpul electromagnetic, ceea ce poate duce fie la un flux de electroni și fotoni având divergența mică și care se propagă în direcția înainte (verde) și / sau la separarea sarcinilor care în plus față de electroni va conduce și la accelerarea protonilor într-un con cu deschidere mare [1]

Activități: Studiarea defectelor structurale în cristale $(\text{Ba/Ca})\text{F}_2$ înainte de iradiere.

1. Spectroscopie de absorbție/transmisie IR-VIS-UV a cristalelor $(\text{Ba/Ca})\text{F}_2$ înainte de iradiere
2. Măsurarea parametrilor celulelor solare la BOL
3. Expunerea probelor la un fluxul adecvat de protoni și electroni generat la ELI-NP.
4. Studiarea defectelor structurale în cristale $(\text{Ba/Ca})\text{F}_2$ după iradiere.
5. Spectroscopie de absorbție/transmisie IR-VIS-UV a cristalelor $(\text{Ba/Ca})\text{F}_2$ după iradiere
6. Măsurarea parametrilor celulelor solare la EOL

(Toși parametrii celulelor solare trebuie măsurași în condiții standard AM0)

Echipament necesar pentru testarea celulelor solare: Simulator SOLAR AM0, (e.g. <http://www.newport.com/lcs-100-series-small-area-solar-simulators/1014653/1033/info.aspx>)
Seria LCS-100 de simulatoare solare este destinată cercetării de performanță, sistemul este certificat ABB conform standardelor ASTM și IEC. Suprafața iluminată este de 1.5 x

1.5 inch (38 x 38 mm). Simulatorul este general, putând fi echipat cu diverse filtre, inclusiv AM0).

A1.2 Iradierea cristalelor dopate de fluoruri pentru studii fundamentale asupra modificării proprietăților optice

Obiectiv. Utilizarea radiației generate prin mecanismul de accelerare a plasmei cu laserul (APL) la ELI-NP pentru a studia schimbarea proprietăților optice și dielectrice a materialelor cristaline iradiate în perspectiva obținerii de noi proprietăți laser ale materialelor, pentru posibile aplicații. Acest obiectiv se încadrează în direcția trasată de task-ul 3 al Memoriului Tehnic (Technical Design Report) curent al ELI-NP: *"Studii fundamentale în domeniul efectelor radiației energetice multi-componentă asupra materiei condensate"* ("Fundamental researches in the field area of energetic and multi-component ionising radiation fields effect on condensed matter")

Fundament științific. Interesul pentru creșterea și caracterizarea cristalelor la Universitatea de Vest din Timișoara, la Facultatea de Fizică a început acum 40 de ani. *Laboratorul de studiu al cristalelor - creștere și caracterizare* este o parte a Departamentului/Facultății de Fizică a Universității de Vest din Timișoara. Principalul scop a fost proiectarea instalațiilor și elaborarea de tehnologii pentru a obține și a caracteriza cristalele obținute. Participarea UVT la colaborarea cu ELI va avea un impact semnificativ asupra cercetării organizației/instituției în domeniul creșterii cristalelor în principal pe două nivele:

- la nivelul cercetării fundamentale - studiile comportamentului cristalelor în medii extreme (o temă centrală în experimentele cu materiale propuse la ELI-NP), va ajuta la dobândirea unei înțelegeri fundamentale a degradării cristalelor prin iradiere, profitând de proprietățile specifice ale radiației produse cu ajutorul laserului, cum ar fi scara ultrascurtă de timp în care radiația este generată și spectrul ei energetic relativ larg, spre deosebire de laboratoarele tradiționale de fizică nucleară [12].

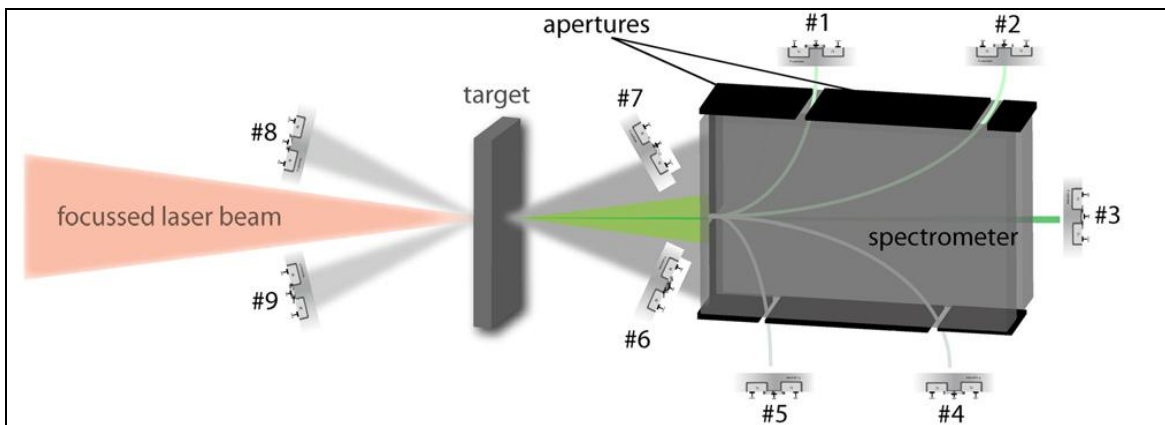
- la nivelul cercetării aplicate – experimentele realizate pe cristale expuse la iradiere de energie ridicată ar putea duce la obținerea de noi materiale laser pentru aplicații biomedicale prin mecanisme de conversie de sarcină a elementelor dopante din cristal cu ajutorul radiației.

Monocristalele de fluoruri sunt o clasă importantă de materiale în tehnologiile moderne pentru elaborarea de laseri cu mediul activ solid și de detectori de radiație. Cristalele de CaF_2 și de BaF_2 dopate cu pământuri rare sunt utilizate ca medii active laser datorită proprietăților optice excelente ale cristalelor de fluorură și datorită tranziției de bandă largă a diferiților ioni de pământuri rare utilizați ca dopanți în aceste cristale. De exemplu, proprietățile ionilor de Er^{3+} au fost studiate în mod extensiv datorită luminescenței lor puternice în IR, utilizată pentru regenerarea pielii umane /epidermei [13], în timp ce luminescența ionilor de Yb^{2+} (în jurul valorii de 314 nm) poate fi utilizată în fototerapia pentru tratamentul psoriazisului [14, 15, 16]. Prin doparea CaF_2 sau a BaF_2 cu YbF_3 , atât ionii de Yb^{2+} , cât și de Yb^{3+} vor coexista în cristalul obținut. Ionii de Yb^{2+} sunt responsabili pentru emisii în domeniile spectrale UV și VIS [17,18] și ionii de Yb^{3+} sunt responsabili pentru emisii în domenii IR apropiat [19,20].

Modificarea stării de ionizare a ionilor de Yb^{3+} dopați în cristalul de CaF_2 poate avea loc datorită iradierii cu raze γ [21]. Formarea de centri de culoare are loc după

iradierea cu electroni [22]. De asemenea, există posibilitatea ca simetria poziției în matricea cristalină a ionilor trivalenți de pământuri rare să se schimbe prin captarea de electroni sau protoni din fasciculul de radiație generată cu laserul, ducând la schimbarea câmpului cristalin din jurul dopantului. Schimbarea de câmp cristalin din jurul dopantului, generează nivele electronice diferite, unele dintre acestea putând fi nivele metastabile, care ar putea fi utile pentru noi aplicații laser. Proprietățile de după iradiere a ionilor de pământuri rare utilizați ca dopanți în CaF_2 și CaBa_2 pot fi studiate folosind spectroscopia optică și dielectrică pentru înțelegerea fundamentală a defectelor specifice formate prin iradiere.

Propunerea tehnică. Structura defectelor formate prin iradiere depinde de energia radiației corpusculare. Posibilitatea obținerii unui spectru energetic eterogen a fasciculelor de electroni și protoni prin mecanismul de accelerare cu laserul ALP cu ajutorul unui singur puls laser este utilă pentru realizarea unei expuneri necostisitoare, rapide și simultane a diferitelor segmente ale unei probe cristaline (sau a mai multor probe simultan) la energii diferite în poziții diferite, prin utilizarea unui câmp magnetic deflector, după cum a fost propus și în [12] (a se vedea figura dedesubt). Un aspect foarte important al utilizării radiației obținute prin mecanismul ALP pentru a induce în mod controlat defecte optice în cristale constă în disponibilitatea unei surse ieftine și ușor reglabile de protoni, în comparație cu costurile ridicate pe care le implică acceleratoarele clasice de protoni. De asemenea, conversia de sarcină a Yb^{3+} în Yb^{2+} ar putea fi rapid realizată cu ajutorul dozei ridicate per puls al radiației obținută prin mecanismul ALP la ELI-NP, cu scopul îmbunătățirii intensității emisiei în UV specifică Yb^{2+} , care poate fi apoi utilizat ca mediu activ în laseri pentru tratamentul psoriazisului.



Schiță a unei instalații de testare simultană a mai multor probe cristaline, cu ajutorul radiației generate prin mecanismul ALP. Electronii și protonii/ionii de spectru energetic exponențial generați cu ajutorul unui singur puls laser sunt deflecați în funcție de sarcina, energia și masa lor de un câmp magnetic bazat pe magneți permanenți. Mai multe suporturi experimentale (de la #1 la #9) pot fi folosite pentru a testa mai multe probe în timpul aceluiași puls [12]

Activități.

1. Creșterea de cristale de $(\text{Ba}/\text{Ca})\text{F}_2$ dopate cu diverse concentrații de pământuri rare

2. Spectroscopie de absorbție/transmisie în IR-UV-VIS a cristalelor de (Ba/Ca)F₂ dopate cu diferite concentrații de pământuri rare înainte și după iradiere
3. Spectroscopie dielectrică a cristalelor de (Ba/Ca)F₂ dopate cu diferite concentrații de pământuri rare înainte și după iradiere

A1.2 Proiectarea unei instalații experimentale pentru iradierea materialelor cu particule accelerate cu laserul

Standul experimental pentru iradierea cu particule generate prin mecanismul ALP a probelor cristaline și a celulelor solare a fost proiectat pentru a fi integrat în interiorul camerei de interacțiune a laserului de la infrastructura CETAL. O imagine 3D a standului proiectat este prezentată în figura 1.

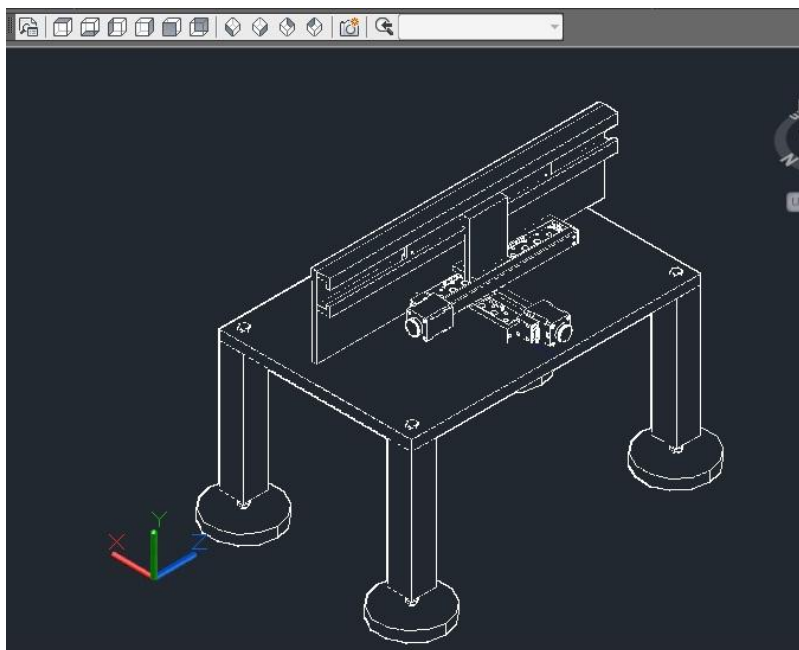


Figura 1. Vedere 3D a standului experimental proiectat

Constrângerea în proiectare a fost dată de înălțimea de 498 mm la care trece fasciculul de particule față de masa optică. În esență, standul experimental se compune din trei părți: (1) Masa suport prevăzută cu picioare reglabile care permit reglarea fină a orizontalității și ajustarea colimatorului în raport cu centrul fasciculului de particule; (2) Colimatorul montat pe un stagiul de translație cu cursa de 200 mm, care permite deplasarea în lungul axei fasciculului de particule și permite reglarea fluenței. Fereastra colimatorului este detașabilă, având astfel posibilitatea de a schimba forma orificiului și filtrul în funcție de necesități. Filtrul are rol de a feri proba de resturile materiale rezultate în urma impactului radiației laser cu șinta. Un al doilea stagiul de translație se află montat perpendicular pe primul și permite poziționarea probelor experimentale în fața ferestrei colimatorului.

Proiectul standului experimental este desenat în patru planșe de execuție care conțin detaliile de realizare (Anexa 2). De asemenea, în Anexa 2 este prezentată fișa tehnică a

stagiului de translație. De notat că stagiul este compabil cu funcționare în vid, este acționat de un motor pas cu pas și este controlat de computer.

A fost realizat un fișier .dwg pentru vizualizarea 3D, care poate fi importat în proiectul camerei de interacție laser de la CETAL.

2.1 Creșterea de cristale de BaF₂ dopate cu diverse concentrații de YbF₃

Metoda solidificării controlate într-un creuzet sau tehnica Bridgman este una dintre cele mai utilizate metode de obținere a cristalelor, fiind folosită pentru obținerea unei game variate de materiale : fluoruri, semiconductori, cristale laser etc.

În cazul **metodei Bridgman** [23] distribuția temperaturii de-a lungul încălzitorului este arătată în figura 1a. Se observă că această distribuție a temperaturii nu permite ca toată substanța să fie topită la începutul solidificării, respectiv topitură și cristal în timpul procesului de solidificare. Distribuția temperaturii de-a lungul încălzitorului în cazul **metodei Stockbarger** [24] se vede în figura 1b. Remarcăm faptul că datorită distribuției temperaturii din încălzitor, substanța din creuzet este complet topită la începutul procesului de creștere. În tot timpul procesului de solidificare, substanța cristalizată este în partea de jos a creuzetului și sub formă de topitură în partea superioară.

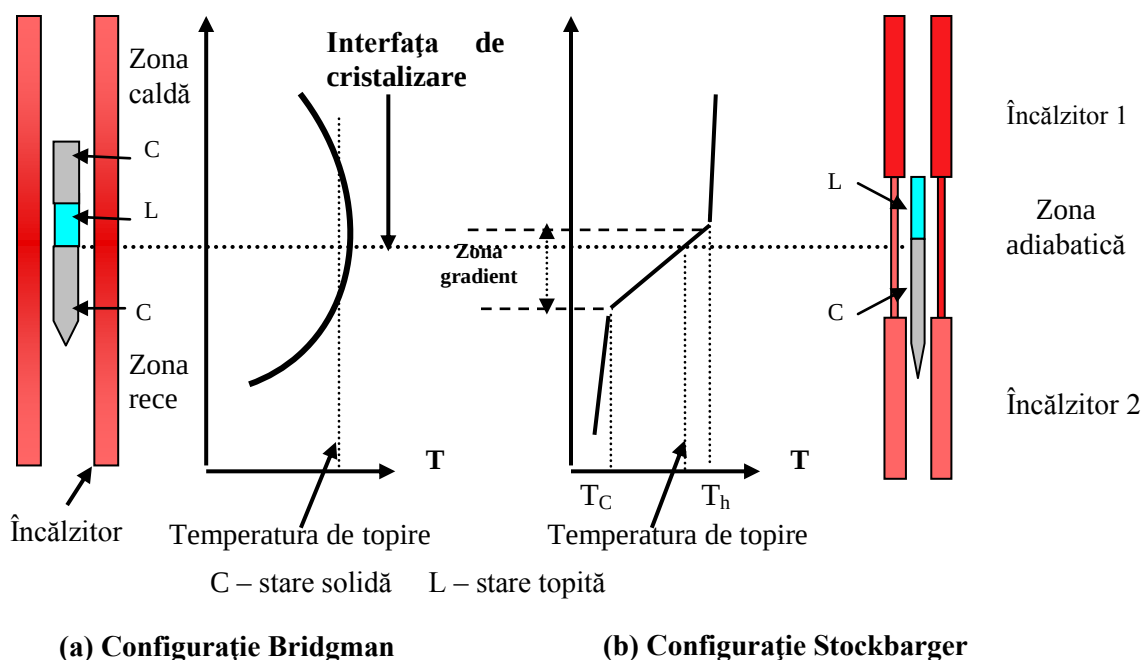
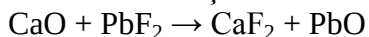


Fig. 1. Configurația Bridgman și Stockbarger

Perfecțiunea unui cristal obținut prin metoda Bridgman-Stockbarger este influențat puternic de forma macroscopică a interfeței solid-lichid. Această formă este determinată de transferul termic și în special de direcția fluxului termic în apropierea interfeței.

Pentru eliminarea apei și a oxigenului din rețeaua fluorurii de calciu (respectiv bariu), la substanța de bază care se introduce în creuzet trebuie să se adauge 4% PbF₂ cristalizat [25]. Dacă în substanța de bază este CaO (respectiv BaO) atunci are loc reacția:



și gazul PbO astfel format se elimină la 700-800°C prin sistemul de vidare dacă se menține timp de 1-3 ore temperatura mai sus menționată.

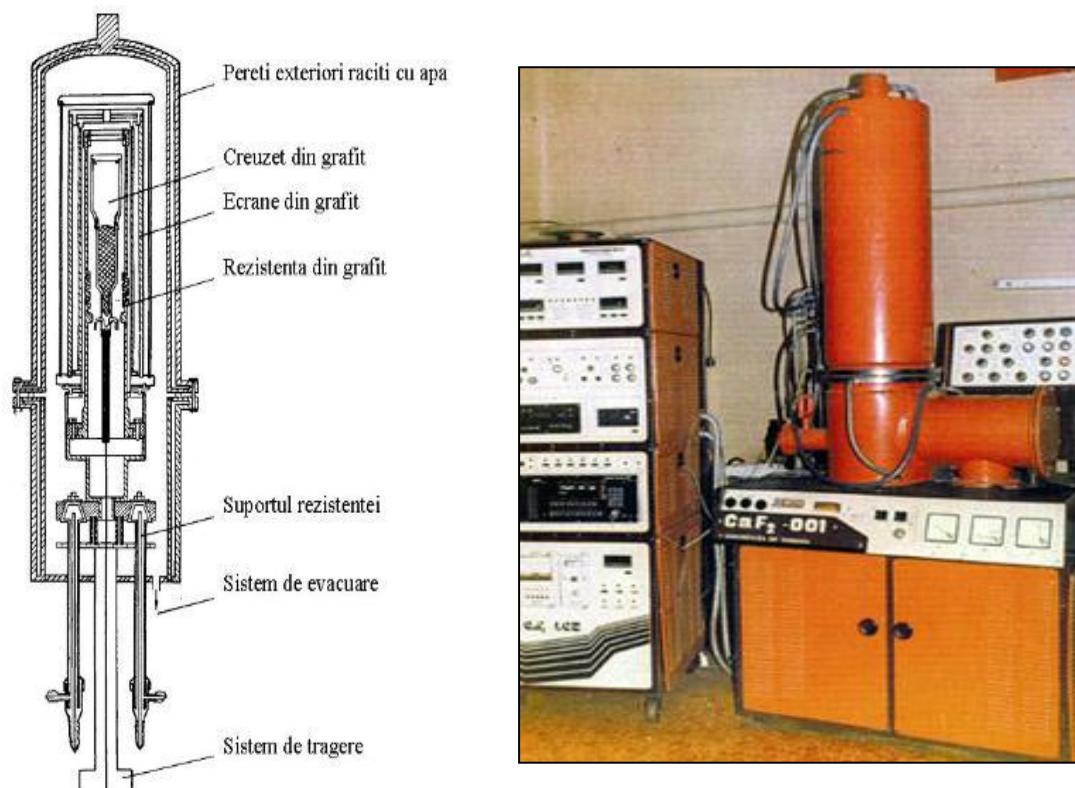


Fig. 2. Instalația Bridgman de la Universitatea de Vest din Timișoara

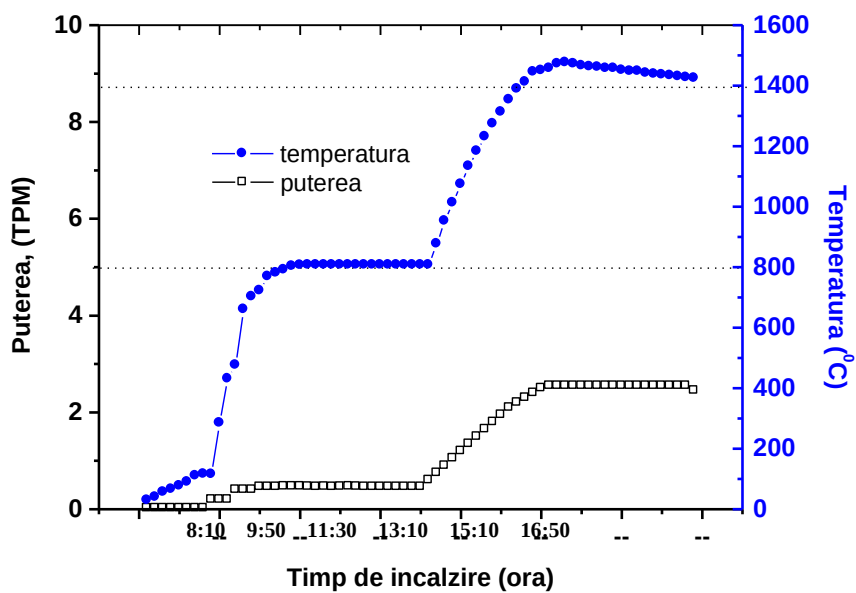


Fig. 3 Determinarea puterii și a timpului necesar pentru a obține temperatura de topire (1380°C) și temperatura de uscare (800°C) a materiei prime utilizate.

Cristalele studiate în cadrul acestui contract au fost obținute prin metoda Bridgman descrisă mai sus, în instalația de obținere a cristalelor [26, 27, 28] existentă în cadrul Facultății de fizică, Laboratorul de obținerea și caracterizarea cristalelor.

În figura 3 se arată modul în care se determină puterea și timpul necesar pentru a obține temperatura de 800°C necesar pentru tratarea substanței de baza și $\approx 1400^{\circ}\text{C}$ necesar pentru topirea materialului (în cazul CaF_2).

Determinarea condițiilor de creștere a cristalelor de BaF_2 este mai dificilă datorită următoarelor probleme:

- ❖ Temperatura de topire-solidificare găsită în literatura de specialitate variază între 1350°C și 1405°C , ca urmare a trebuit să se găsească temperatura de topire a materiei prime folosite experimental,
- ❖ Nu sunt informații referitoare la comportarea fluorurii de bariu în prezența grafitului din care este confecționat creuzetul,
- ❖ Încălzitorul de grafit folosit pentru creșterea cristalelor de CaF_2 trebuie adaptat pentru obținerea condițiilor de creștere al cristalelor de BaF_2 .

Din cele 20 de experimente, primele 10 au vizat comportarea materiei prime în raport cu grafitul și determinarea temperaturii de topire. Pentru obținerea cristalelor de BaF_2 a fost confecționat un nou creuzet. Nu s-a folosit cel cu care s-au obținut cristalele de CaF_2 . Pentru început s-a folosit încălzitorul de grafit utilizat la creșterea cristalelor de CaF_2 și aranjamentul ecranelor fără nici o modificare. În figura 4 se arată distribuția temperaturii de-a lungul încălzitorului folosit pentru a testa creuzetul și topirea materiei prime.

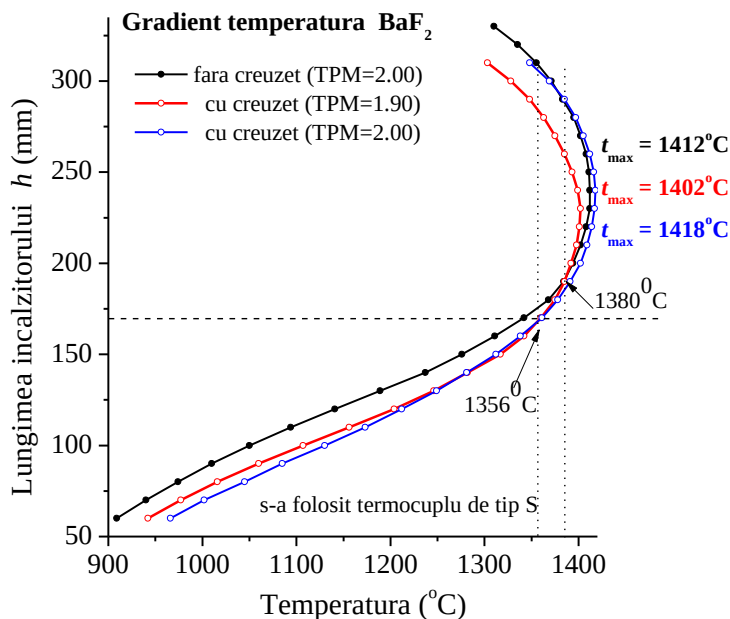


Fig 5.

Fig 4. Distribuția temperaturii de-a lungul încălzitorului în diferite condiții precizate în figură.

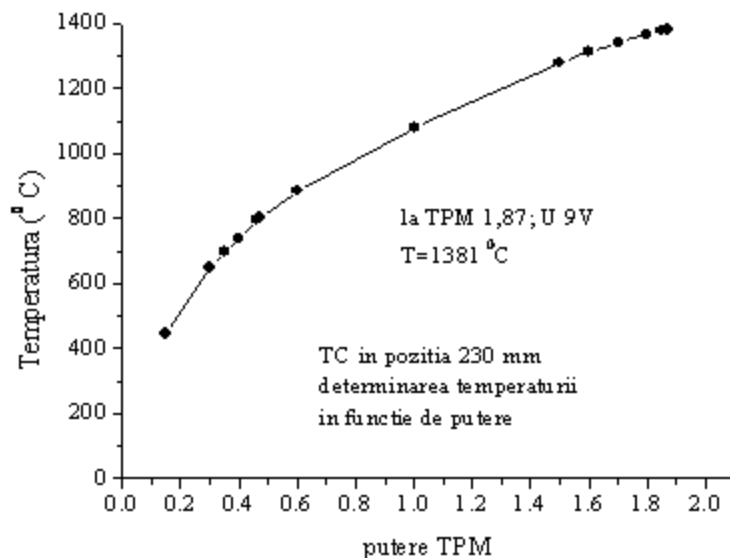


Fig. 6.

În urma experimentului s-a constatat că încărcătura nu iese din creuzet. De topit s-a topit dar probabil că șarja a aderat la pereții creuzetului. S-a reluat experimentul, dar nici acum nu s-a putut scoate șarja. Pentru a vedea ce s-a întâmplat s-a tăiat creuzetul, așa cum se vede în figura 5. unde se observă că solidul a aderat la pereții creuzetului. S-a confecționat un alt creuzet care a fost ars de două ori la 1500°C și peretele interior lustruit foarte bine. Din aceste experimente s-a constatat că s-a evaporat prea multă substanță deoarece temperatura de lucru peste 1400°C este prea mare. Probabil temperatura de topire este sub 1380°C . Ca urmare s-a studiat dependența de putere a temperaturii în poziția 230mm. Aceste măsurători sunt arătate în figura 6.

În experimentul 7 s-a măsurat distribuția temperaturii pentru TPM 1,87 și $U=9,1\text{ V}$. S-a ales un maxim de 1386°C în poziția de 270 mm, vezi figura 7 Așezând vârful creuzetului în poziția 227 mm, (termoculu TC la 220 mm) substanța nu s-a topit în experimentul următor. Lungimea creuzetului cu substanță are 10 cm așa că rezultă că zona cu temperatura maximă nu este suficient de lungă. În următorul experiment TC s-a pus în poziția 230 mm astfel că vârful creuzetului se găsește în poziția 237 mm. Cristalul obținut prezenta o serie de defecte datorită creșterii dendritice (fig 8), ceea ce înseamnă că condițiile de solidificare nu sunt corecte, mai exact gradientul de temperatură este prea mare.

Din aceste experimente rezultă că trebuie modificat sistemul de ecrane pentru a obține cristale fără defecte. Aceste defecte apar datorită unei solidificări prea rapide - un gradient de temperatură la începutul creșterii mai mare $10\text{-}15^{\circ}\text{C/cm}$.

Pentru a ameliora gradientul de temperatură ecranul din Molibden și cel din pâslă de grafit a fost mărit.

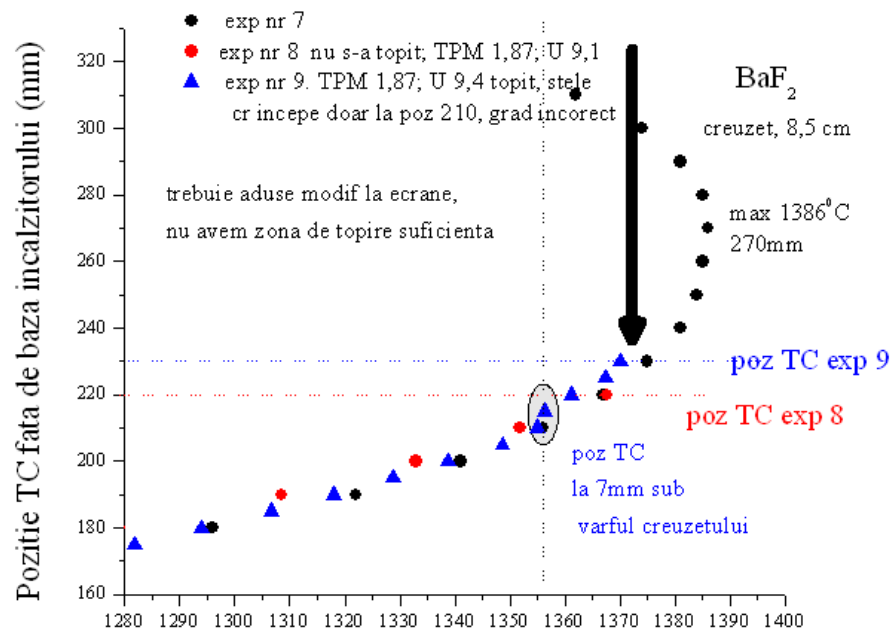


Fig. 7.

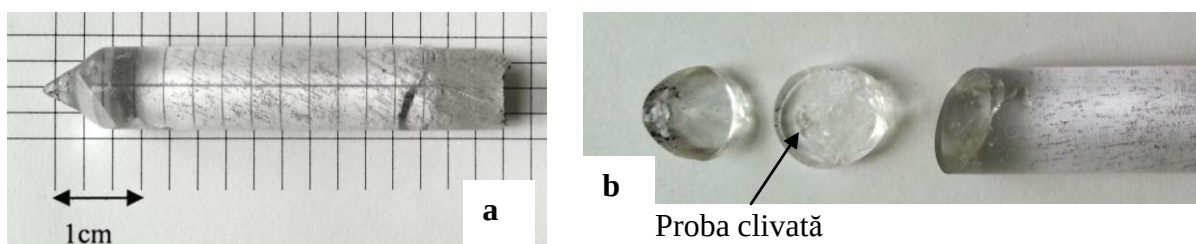


Fig. 8. (a) Cristal BaF_2 și (b) cristal clivat planul (111).

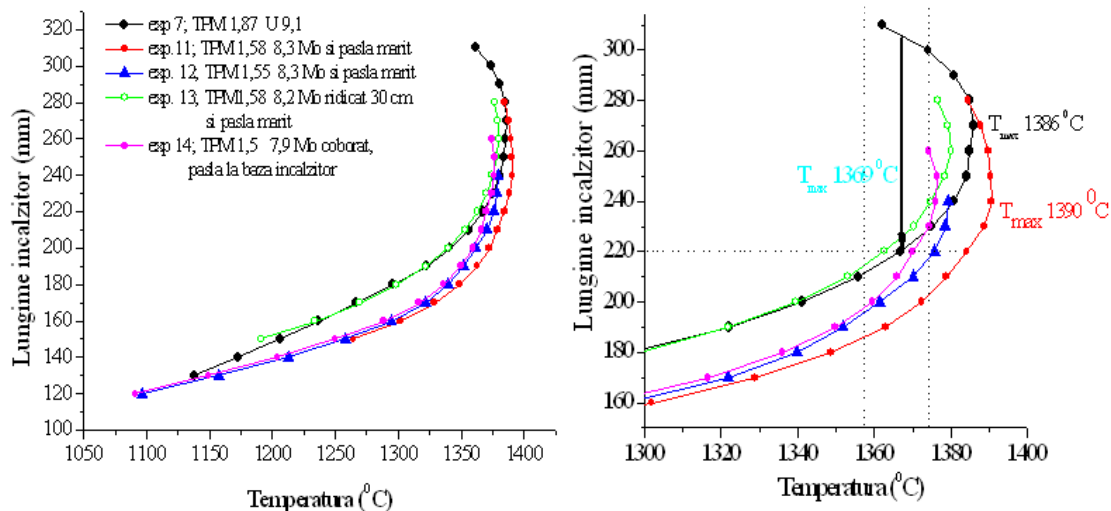


Figura 9. Distribuția temperaturii de-a lungul încălzitorului pentru diferite aranjamente ale ecranelor și diferite valori ale puterii, specificate în figură.

În figura 9 sunt prezentate rezultatele a 5 experimente în comparație cu distribuția temperaturii înainte de modificările aduse ecranelor- graficul de culoare neagră. Mărirea completă a ecranului de Mo nu este benefică (graficul roșu), temperatura maximă este prea mare ($1390,6^{\circ}\text{C}$) și gradientul de creștere este prea mare; procesul de solidificare s-ar începe doar din poziția 175 mm. Pentru obținerea cristalelor s-a ales distribuția corespunzătoare experimentului 14.

Experimentul 15 a fost dedicat obținerii unui cristal de BaF_2 prezentat în figura 10.

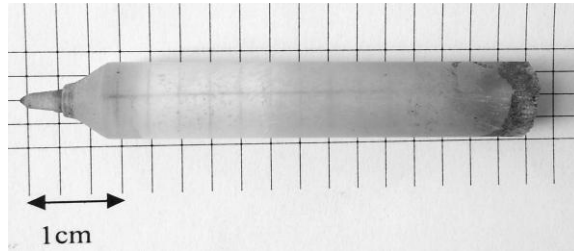


Fig. 10.

În figurile următoare sunt prezentate 5 cristale de BaF_2 dopate cu diferite concentrații de YbF_3 . pentru fiecare cristal se arată și distribuția temperaturii în timpul creșterii în comparație cu distribuția determinată în experimetul 14 (graficul de culoare neagră).

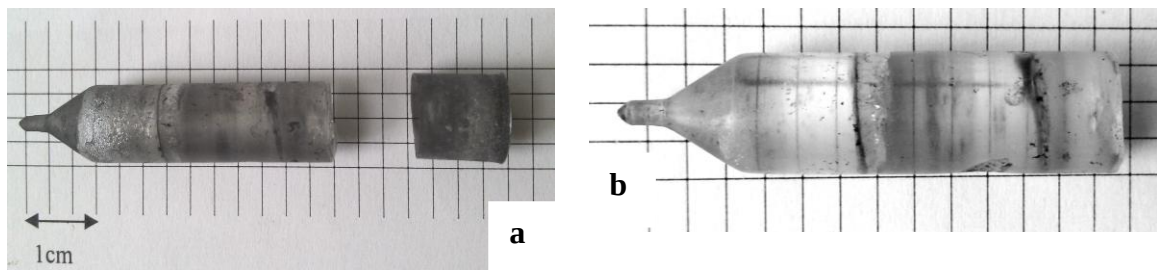


Fig. 11. (a) Cristal BaF_2 așa cum a fost scos din creuzet, înainte de a fi curățat cu grafit;
(b) după ce a fost curățat. Poziția creuzetului în încălzitor nu a fost bine ales;

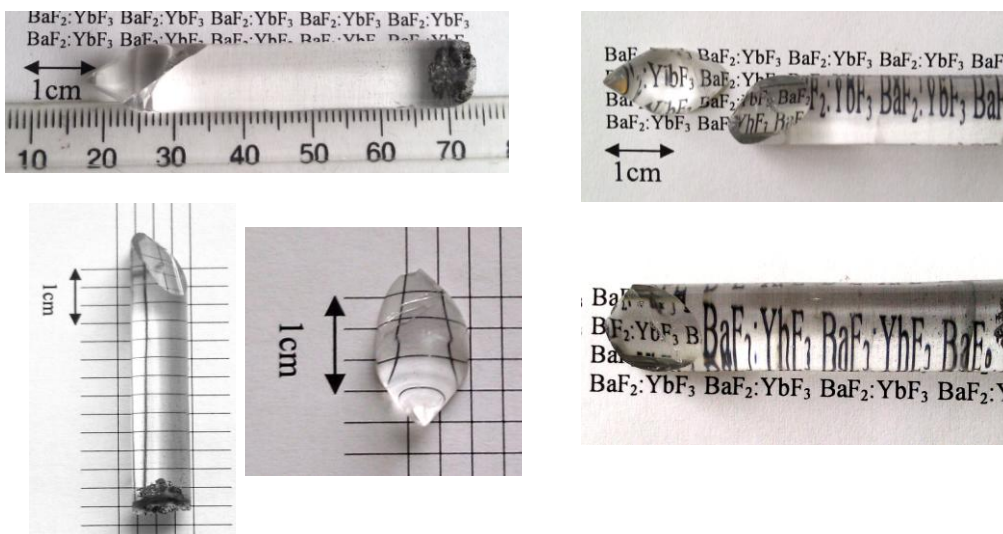


Fig.12. Cristal $\text{BaF}_2 : 0, 17 \text{ YbF}_3$

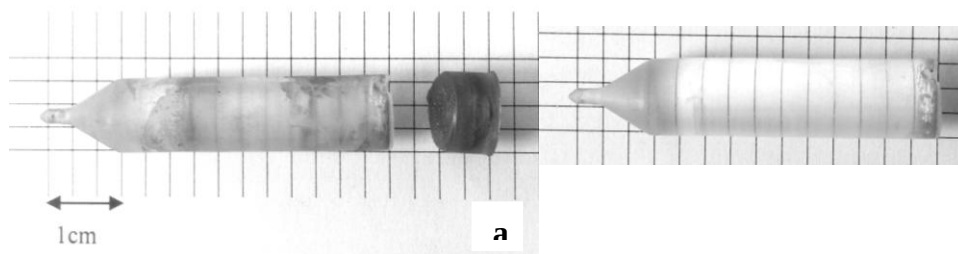


Fig. 13. Cristal $\text{BaF}_2:0.05\text{mol\%YbF}_3$ (a) înainte de a

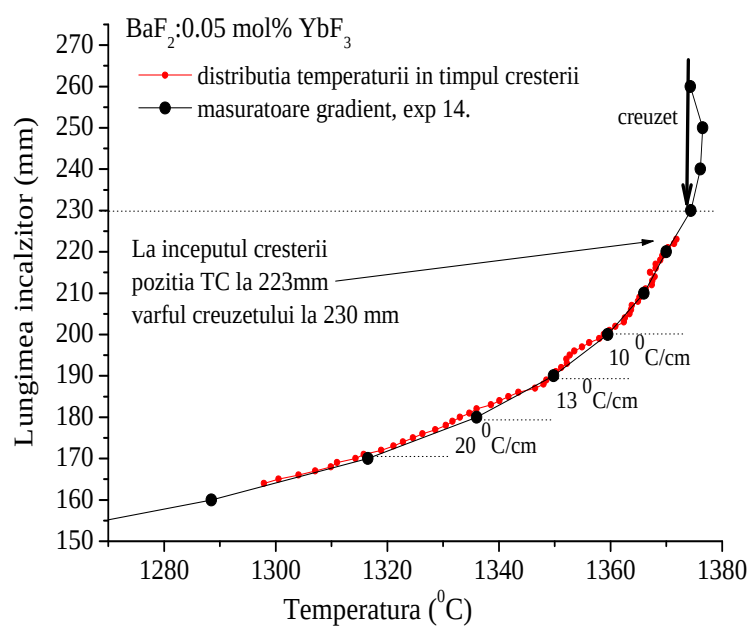


Fig. 14. Distribuția temperaturii în timpul procesului de solidificare.

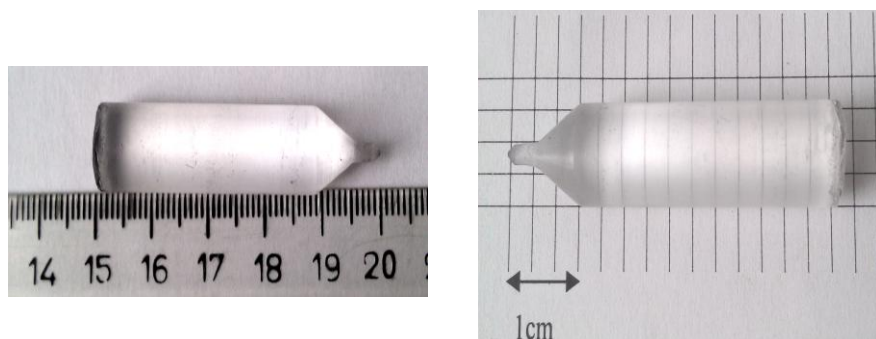
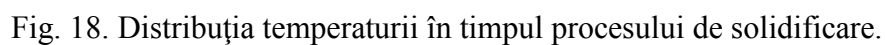
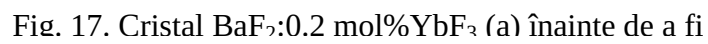
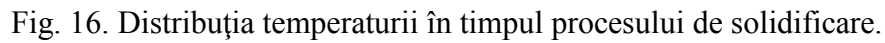


Fig. 15. Cristal
 $\text{BaF}_2:0.1\text{mol\%YbF}_3$



În figura 19 se arată spectrul de absorbție a trei cristale; se observă benzile de absorbție corespunzătoare ionilor Yb^{2+} (fig 20) și a celor trivalenți Yb^{3+} (fig 21). Odată cu creșterea concentrației de YbF_3 coeficientul de absorbție crește. Intensitatea benzilor de absorbție corespunzătoare ionilor bivalenți este de 10 ori mai mare decât a celor trivalenți. Intensitatea benzilor de absorbție crește odată cu creșterea concentrației de YbF_3 .

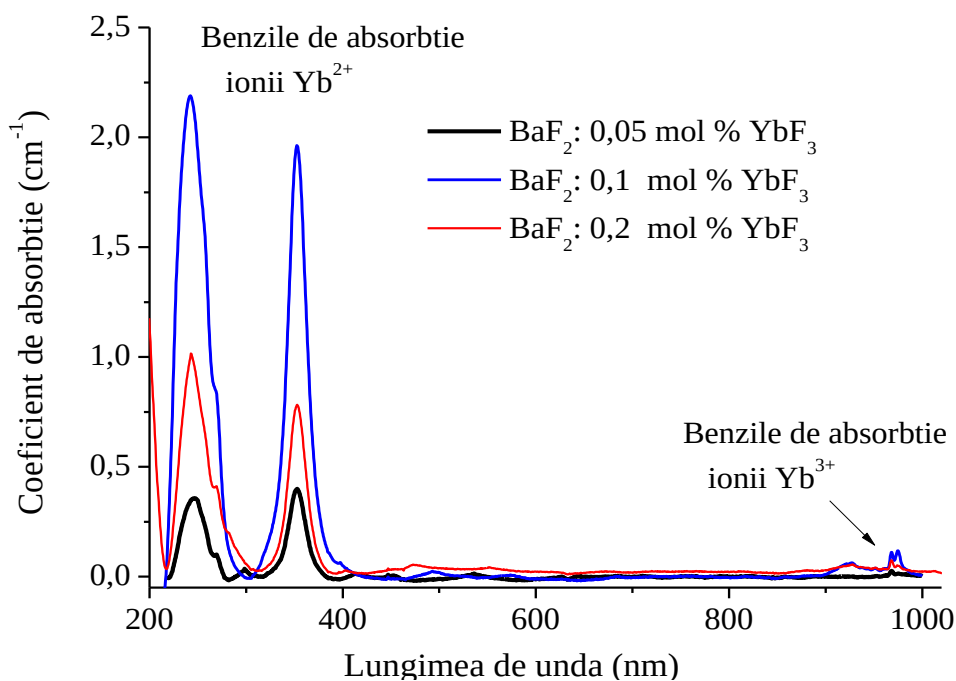


Fig.19. Spectrul de absorbție pe domeniul 200-1000nm.

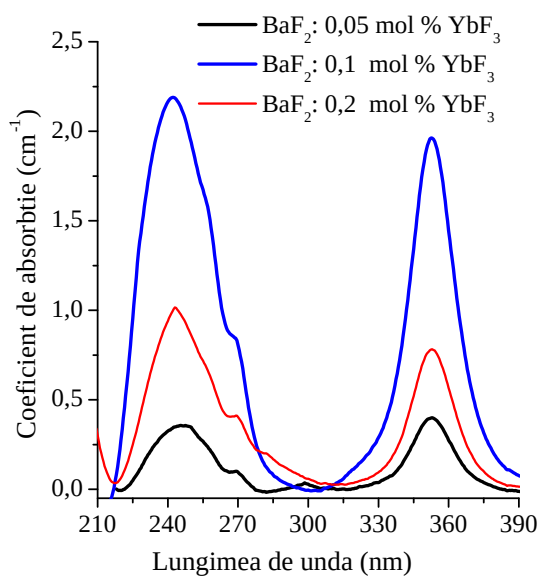


Fig.20. Benzile de absorbție a ionilor Yb^{2+} .

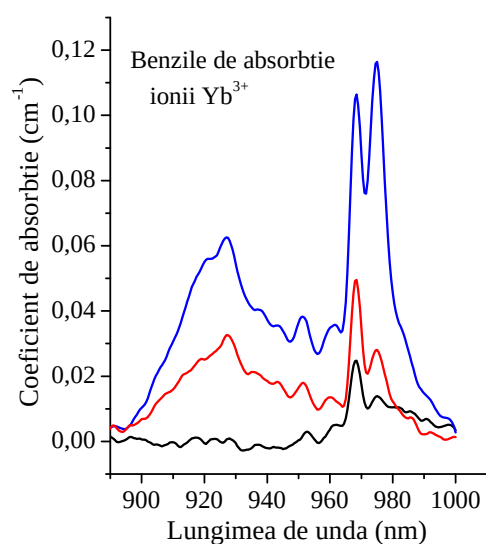


Fig.21. Benzile de absorbție a ionilor Yb^{3+} .

A2.2. Creșterea de cristale de CaF_2 dopate cu diverse concentrații de YbF_3

Dacă etapele procesului de creștere sunt îndeplinite corect atunci în cristale nu rămân ioni de Pb înglobați în rețea. Analizând spectrul de absorbție al unor cristale obținute s-a constatat că acestea prezintă în domeniul UV benzi de absorbție caracteristice pentru ionul Pb^{2+} (Fig.22), ceea ce înseamnă că plumbul nu a fost eliminat complet prin procedeul standard de creștere. Benzile de absorbție caracteristice ionilor de Pb^{2+} sunt: A=306nm, B=257nm, C=(248nm, 240nm, 232nm) și D=(216, 207nm).

Există cel puțin două explicații pentru apariția benzilor caracteristice ionilor de Pb:

- Dacă lipsește CaO sau este puțin în substanța de bază atunci neavând loc reacția de mai sus, PbF_2 se va îngloba în rețeaua cristalului de CaF_2 .
- Dacă nu se respectă procedeul standard al procesului de creștere, adică nu se menține timp de o oră temperatura caracteristică de reacție sau nu se atinge temperatura necesară fiindcă nu s-a stabilit corect puterea pe încălzitor (vezi fig.3) atunci reacția nu are loc, nu se formează oxidul de plumb care se elimină prin sistemul de vidare și PbF_2 se va îngloba în rețeaua fluorurii de calciu.

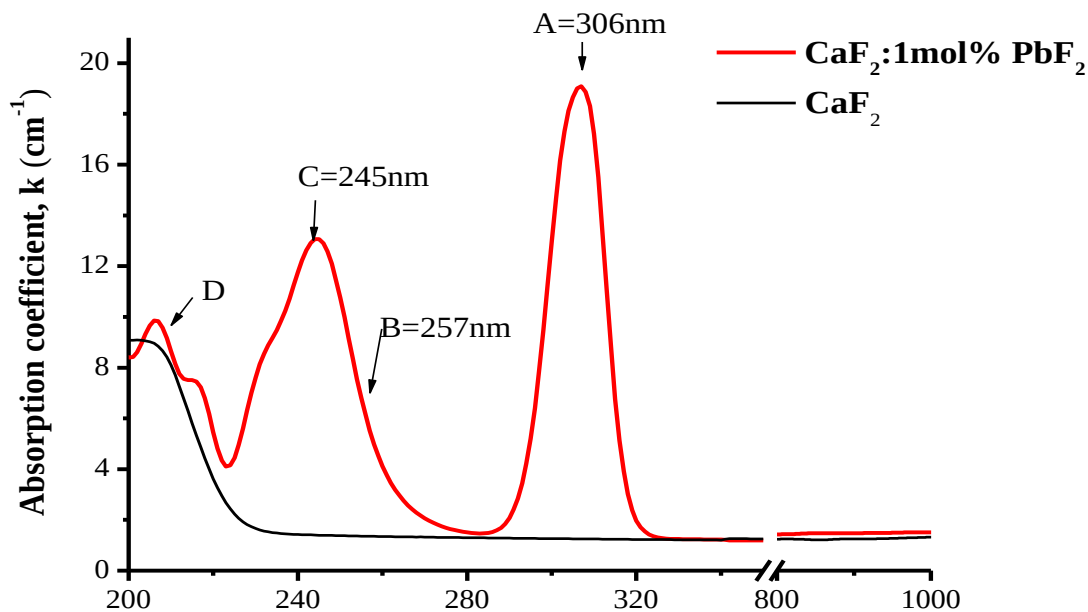


Fig. 22. Spectrul de absorbție al cristalelor de CaF_2 pure și dopate cu PbF_2 .

Dacă procesul de creștere nu este corect executat, urmele de ioni de Pb^{2+} pot fi detectate măsurând spectrul de absorbție al cristalului obținut. În figura 23 se văd spectrele de absorbție a două cristale de CaF_2 dopate cu YbF_3 : unul fără plumb și unul cu urme de Pb.

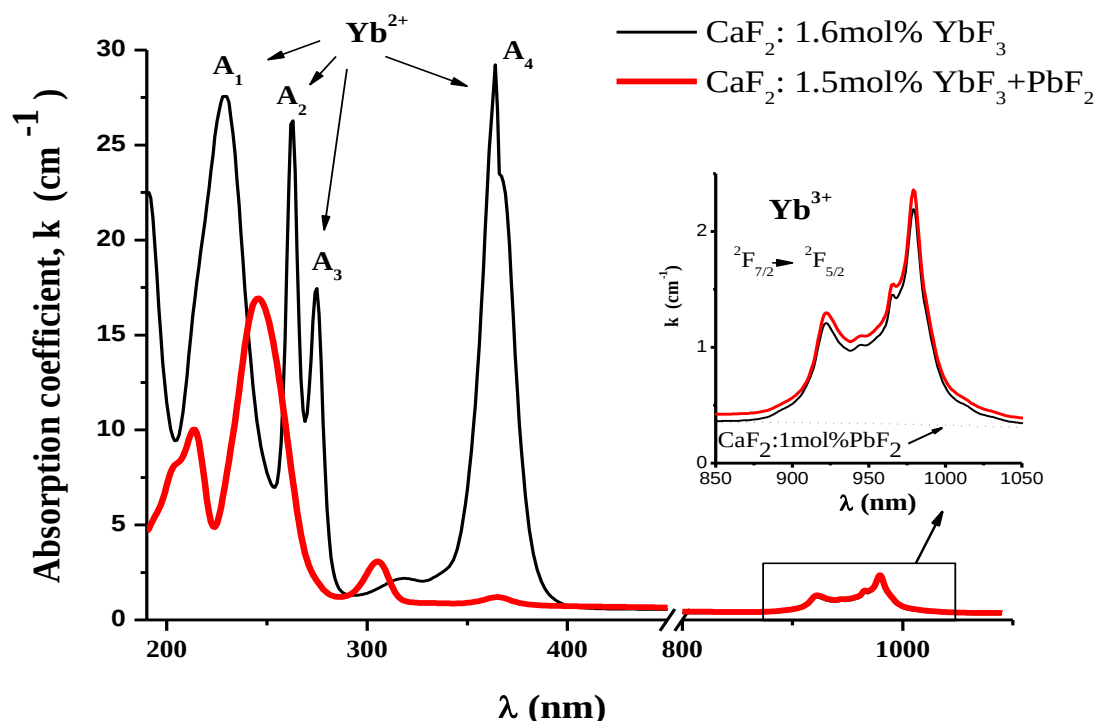


Fig. 23. Spectrul de absorbție al cristalelor de CaF_2 dopate cu YbF_3 și cu urme de plumb.

Se observă că deși banda de absorbție caracteristică pentru ionii Yb^{3+} din domeniul IR apropiat nu este puternic afectată de prezența ionilor de Pb în cristal, în domeniul UV apare o deteriorare drastică a benzilor de absorbție caracteristice ionilor de Yb^{2+} .

Un factor important în controlul calității și a perfecțiunii unui cristal obținut prin solidificare controlată este gradientul de temperatură la interfața de cristalizare. Se știe că fluxul de căldură la interfață este determinat nu numai de distribuția temperaturii în sistemul de încălzire, dar și de proprietățile termice ale substanței care cristalizează și a materialului din care este confecționat creuzetul.

Omogenitatea și perfecțiunea unui cristal obținut prin metoda solidificării controlate sunt influențate puternic de câmpul termic exterior (din încălzitor), de aceea trebuie determinată distribuția temperaturii pe axa încălzitorului, și găsite condițiile optime de creștere: poziția ecranelor, poziția inițială a creuzetului, viteza de coborâre a creuzetului, timpul de răcire până la temperatura camerei, etc. În cristal forma izotermelor variază de la concav spre convex ceea ce demonstrează existența unui gradient de temperatură radial și axial variabil. Aceste variații ale gradientilor termici vor determina apariția unor tensiuni termice a căror relaxare va conduce la formarea dislocațiilor. Pentru obținerea cristalelor s-a măsurat distribuția temperaturii pe axa încălzitorului (fig.24). Modificând puterea pe rezistență și poziția ecranelor se poate obține un gradient de temperatură în zona de cristalizare de $15\text{-}20^\circ\text{Ccm}^{-1}$ valoare găsită optimă pentru obținerea cristalelor.

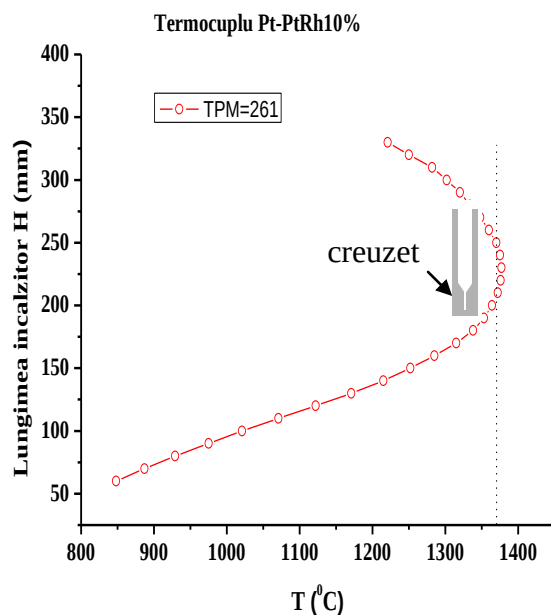


Fig. 24. Distribuția temperaturii de-a lungul axei de simetrie a încălzitorului.

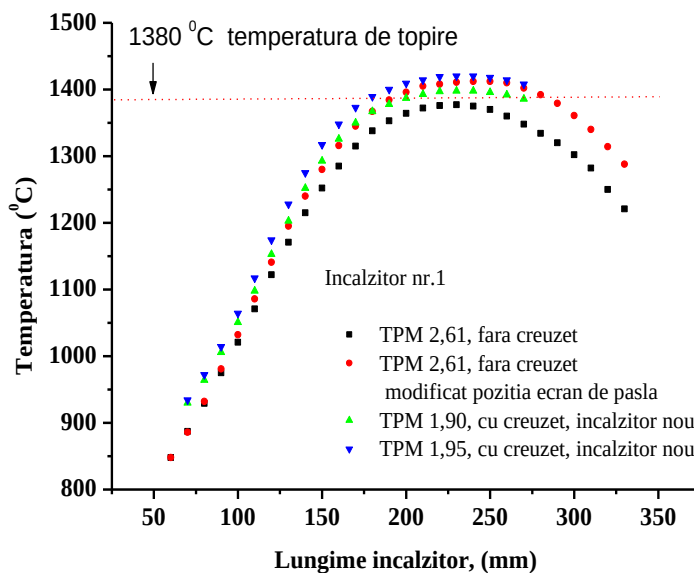


Fig.25. Distribuția temperaturii de-a lungul axei de simetrie.

Parametrii procesului de cristalizare care joacă un rol deosebit de important în obținerea cristalelor cu o calitate optică superioară sunt: viteza de coborâre a creuzetului = 4 mm/ora, poziția inițială a acestuia (care se determină pentru fiecare distribuție de temperatură, schițată aproximativ în figura 24) și gradientul de temperatură $\approx 15^{\circ}\text{C}/\text{cm}$.

Pentru obținerea cristalelor s-a măsurat distribuția temperaturii pe axa încălzitorului modificând puterea pe rezistență, poziția ecranelor, până când s-a obținut un gradient de

temperatură în zona de cristalizare de $15-20^{\circ}\text{Ccm}^{-1}$. Trebuie avut în vedere că temperatura maximă în încălzitor să nu depășească 1400°C dar în acelaș timp să se asigure o zonă de temperatură suficient de mare pentru a topi toată încărcătura din creuzet. Așa cum se vede din figura 25 acest lucru se poate realiza folosind puteri de alimentare diferite, așezarea unor ecrane în diferite poziții, etc.

În figurile 26-30 sunt prezentate cristalele obținute. Cristalele sunt incolore și clivează după planul (111).

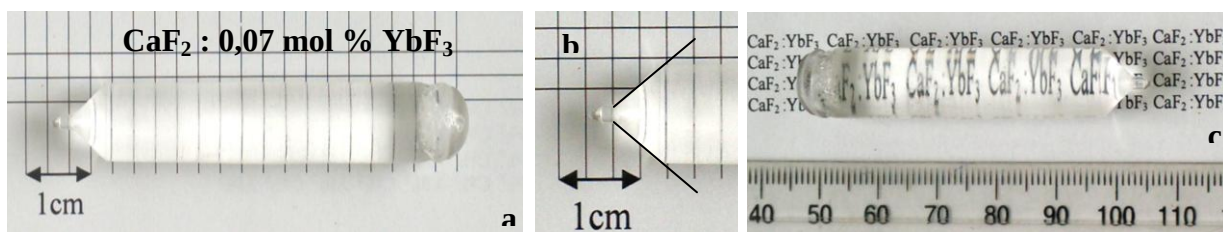


Fig.26

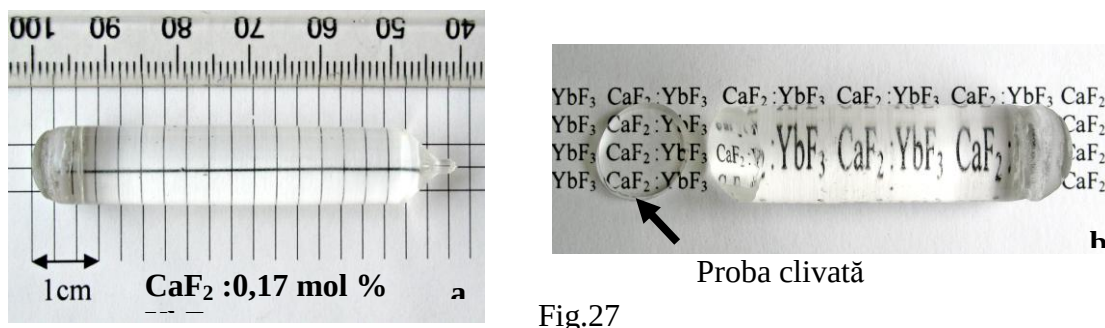


Fig.27

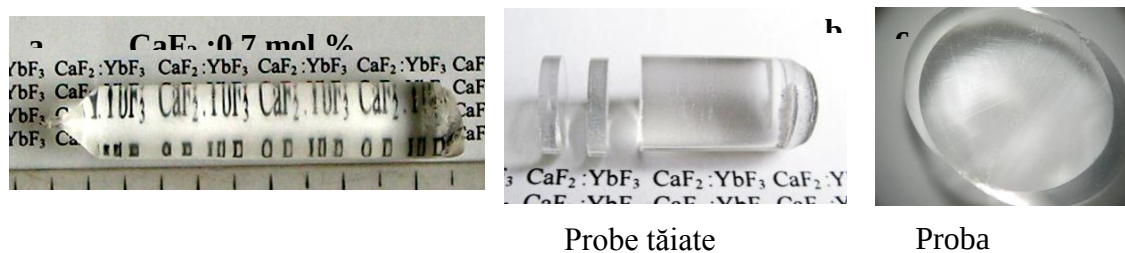
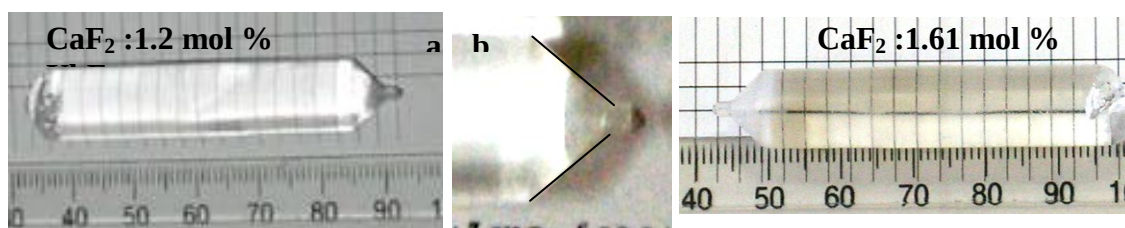


Fig. 28.



Profilul varfului
Fig. 29.

Fig. 30.

Se știe că unghiul de la baza creuzetului joacă un rol important în procesul de nucleație, adică în prima fază a procesului de cristalizare. Verificarea corectitudinii conicității creuzetului se face prin solidificarea rapidă a unei șarje. În figura 31 se arată un astfel de „cristal” împreună cu o parte mărită a vârfului cristalului. Cristalul obținut prezenta macle și creștere dendritică.

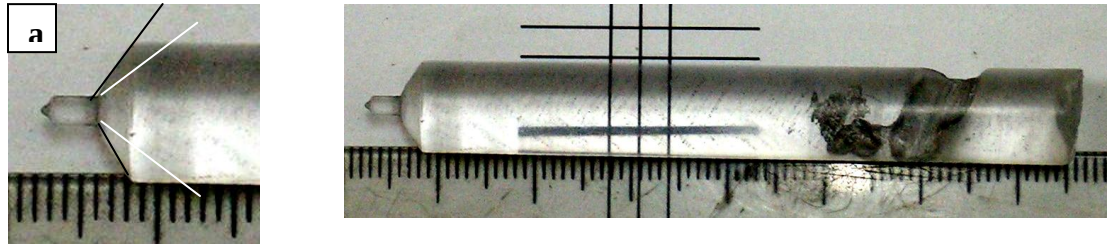


Figura 31. „Cristal” solidificat rapid pentru a testa corectitudinea conicității creuzetului

Comparând lungimea și unghiul conicității acestuia cu cele din figurile 26-30, se observă că (vezi figura 31) în primul caz conicitatea creuzetului nu era corectă. Pentru a obține cristalele dopate conicitatea a fost corectată.

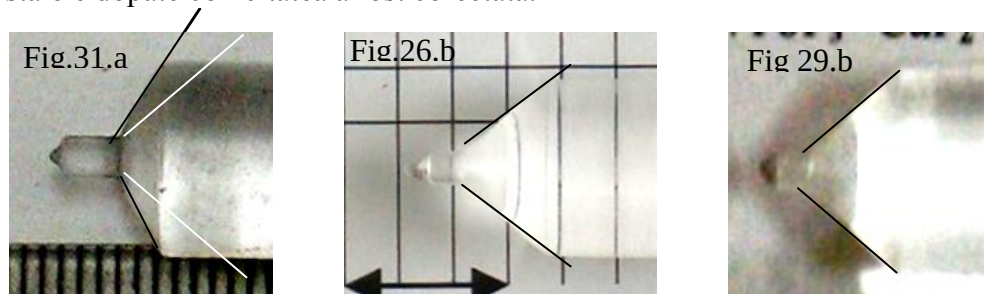


Figura 32. Conicitatea vârfului creuzetelor: în cazul figurii 13a linia neagră corespunde unui Unghi mai mare decât în celelalte două cazuri, creuzete cu care s-au obținut cristale bune; linia albă corespunde unghiului conului din figurile 26b și 29b.

A4.1 Evaluarea programelor de simulare existente, bazate pe metoda PIC (Particle In Cell), pentru accelerarea de particule ca urmare a interacțiunii laser-țintă subțire

Datorită celor mai recente avansuri în tehnologia laserilor, energii și intensități tot mai mari au fost atinse, pregătind calea pentru studierea de noi fenomene ce reprezintă provocări, cum ar fi cele care rezultă în urma interacțiunii laserilor de mare intensitate cu plasmă reci de densitate ridicată.

Particulele accelerate ce rezultă din acest fel de interacțiune reprezintă un studiu de caz interesant luând în considerare experimentele inovatoare ce necesită astfel de energii înalte, dar și datorită similarității lor cu radiația cosmică, asemuire ce poate fi folosită pentru testarea dispozitivelor destinate aplicațiilor spațiale. Analizele experimentale pentru parametri de intrare specifici care dau naștere la astfel de condiții pentru radiație pot fi costisitoare, și deci tratarea problemei dintr-o perspectivă numerică este imperativă.

Astfel de interacțiuni sunt modelate folosind metode de tip Particle-in-Cell (PIC). Metodele PIC sunt în uz încă din 1955 [29], dobândind popularitate pe parcursul deceniilor ce au urmat. Metoda este folosită pe scară largă pentru a modela sisteme cu un număr mare de particule încărcate în câmpul lor electromagnetic self-consistent [30]. Modelarea interacțiunilor laser-plasmă pentru intensități mari ale laserilor folosind coduri PIC se realizează pe baza descrierii plasmei prin intermediul ecuației Vlasov [31] pentru diferitele specii de particule încărcate:

$$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + v_i \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial x_i} + F_{\alpha} \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial p_i} = 0$$

unde $f_{\alpha} = f_{\alpha}(t, x_i, p_i)$ este distribuția în spațiul fazelor a speciei α și F_{α} este forța Lorentz care acționează asupra sa [32]:

$$\vec{F}_{\alpha} = q_{\alpha} \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right)$$

cuplată cu ecuațiile Maxwell:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{E} &= 4\pi\rho \\ \nabla \cdot \vec{B} &= 0 \\ \nabla \times \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \vec{B} &= -\frac{1}{c} \left(4\pi\vec{j} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right) \end{aligned}$$

Totuși, aceasta este o sarcină computațională solicitantă, datorită spațiului fazelor 6-dimensional, astfel încât în locul distribuției continue a densității de particule din spațiul fazelor, metoda PIC ia în considerare super-particule discrete (ce reprezintă o particulă computațională compusă dintr-un număr mare de particule microscopice identice - de ordinul milioane de electroni, protoni și alți ioni - considerați a se mișca împreună în același mod). Aceasta se realizează formal presupunând o reprezentare particulară pentru funcția de distribuție:

$$f_{\alpha}(t, \vec{x}, \vec{p}) = \sum_{l=1}^{N_{Sp}} g(\vec{x} - \vec{x}_l) \delta^3(\vec{p} - \vec{p}_l)$$

care e considerată a fi compusă dintr-un număr N_{sp} de super-particule având o poziție specificată de o funcție localizată $g(\vec{x} - \vec{x}_l)$ și un impuls precis, dat de distribuția delta Dirac 3D $\delta^3(\vec{p} - \vec{p}_l)$. Prin această presupunere, se înlocuiește ecuația Vlasov cu $2N_{sp}$ ecuații de mișcare pentru super-particule, problemă ce este mai ușor tratabilă din punct de vedere computațional:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \vec{x}_l}{\partial t} &= \frac{\vec{p}_l}{m\gamma_l} \\ \frac{\partial \vec{p}_l}{\partial t} &= \vec{F}_l\end{aligned}$$

Aceasta reduce problema la a rezolva doar ecuațiile de mișcare pentru aceste super-particule, în plus față de ecuațiile Maxwell, o sarcină mai puțin solicitantă din punct de vedere al resurselor computaționale. Dar, cu toate că utilizarea super-particulelor reduce numărul de particule simulate, numărul rămâne destul de mare, având în vedere că partea de cod ce constituie particule pusher-ul, trebuie rulată pentru fiecare particulă în parte [33]. O interpretare numerică a acestui sistem de ecuații trebuie să includă deci acest particule pusher, cod ce transportă particulele, soluționând ecuația de mișcare, precum și field solver-ul care rezolvă ecuațiile Maxwell, determinând câmpurile electrice și magnetice.

Particle pusherele pot folosi scheme implicite sau explicite. Solverele implicite utilizează câmpurile deja updatate pentru a calcula viteza particulelor individuale, în timp ce solverele explicite se bazează pe forța din pasul de timp anterior, ceea ce le face să necesite mai puțin timp de rulare. Un astfel de solver explicit este schema Boris, care folosește următoarele ecuații pentru a soluționa coordonatele spațiului fazelor super-particulelor (compuse din particule de sarcină q și masă m) din ecuațiile de mișcare discretizate:

$$\begin{aligned}\vec{x}_{k+1} &= \vec{x}_k + \Delta t \vec{v}_{k+1/2} \\ \vec{v}_{k+1/2} &= \vec{u}' + q' \vec{E}_k\end{aligned}$$

unde Δt este pasul de timp, iar $\vec{x}_k = \vec{x}(t_k)$ și $\vec{v}_{k\pm 1/2} = \vec{v}(t_k \pm \Delta t/2)$ sunt coordonatele spațiului fazelor (fiecare vector având 3 componente), $t_k = k\Delta t$ și cantitățile intermediare:

$$\begin{aligned}\vec{u}' &= \vec{u} + \left(\vec{u} + (\vec{u} \times \vec{h}) \right) \times \vec{s} \\ \vec{u} &= \vec{v}_{k-1/2} + q' \vec{E}_k \\ \vec{h} &= q' \vec{B}_k \\ \vec{s} &= \frac{2\vec{h}}{1 + h^2} \\ q' &= \frac{q}{2m} \Delta t\end{aligned}$$

Field solver-ul poate soluționa ecuațiile lui Maxwell (în general ecuații diferențiale cu derivate parțiale (PDE)) prin diferite metode. Aceste metode sunt împărțite în 3 categorii:

1. Metode cu diferențe finite (FDM), unde domeniul continuu este înlocuit printr-o rețea discretă de puncte în care câmpurile electrice și magnetice sunt soluționate, iar apoi derivatele sunt aproximate cu diferențe între valorile vecine din rețea.

2. Metode cu element finit (FEM), unde domeniul continuu este împărțit într-o rețea de elemente, iar ecuațiile sunt tratate ca probleme de valori proprii, pentru ca mai apoi soluțiile de test prin funcții de bază localizate să fie calculate în fiecare element.
3. Metode spectrale, cum ar fi transformata Fourier rapidă (FFT), care tratează de asemenea PDE-urile ca probleme de valori proprii, dar funcțiile de bază folosite sunt de ordin superior și definite global pe tot domeniul, care în acest caz nu mai este discretizat.

Forțele inter-particule din interiorul celulelor sunt subestimate datorită faptului că field solver-ul nu trebuie să conțină astfel de forțe, iar în interiorul unei celule, câmpul generat de o particulă trebuie să scadă cu cât distanța de la particulă scade. Acest fenomen este compensat de coliziunile Coulomb dintre particule încărcate. Din nou, datorită costului computațional al simulării interacțiunilor pentru fiecare pereche de particule dintr-un sistem mare, diferite metode Monte Carlo au fost dezvoltate pentru a optimiza costul computațional.

Abordarea prin intermediul metodei PIC are unele avantaje în fața încercărilor de a soluționa direct ecuația Vlasov, în afară de faptul că e mai puțin solicitantă din punct de vedere computațional: este generală și poate include și implementarea coliziunilor, ionizărilor și a altor fenomene fizice. Totuși, dezavantajele sunt că rezoluția de densitate ar putea să sufere în unele cazuri (de exemplu pentru gradienti mari), precum și existența unui zgomot statistic.

Mai multe pachete software bazate pe metoda PIC sunt disponibile la nivel mondial la momentul de față, dintre care am selectat câteva în scopul de a le evalua, pe baza nevoilor particulare ale acestui proiect.

1.1 VORPAL

Codul VORPAL [34], folosit pentru simulări în domeniul plasmiei, a fost dezvoltat de grupul Fizica Plasmei și a Razelor din cadrul *Universității din Colorado*, și în prezent este dezvoltat și comercializat de *Compania Tech-X*. VORPAL este scris în limbajul C++ pentru simulări paralele electromagnetice și relativiste pentru fluide și particule încărcate, folosind rețele structurate în 1D, 2D și 3D.

VORPAL este folosit pentru simularea numerică a proceselor avansate de accelerare precum accelerarea particulelor încărcate folosind pulsuri laser. Acest cod folosește tehnicile programării orientate pe obiect pentru a atinge o mai mare flexibilitate și extensibilitate. Acestea permit utilizatorului să simuleze rapid în 2D un scenariu de accelerare avansată pentru a testa rezultatele calitativ, și apoi să poată continua în 3D cu același cod și mici modificări în fișierele de intrare pentru o modelare numerică mai detaliată. VORPAL este proiectat să ruleze pe majoritatea versiunilor de UNIX și de asemenea atât pe sisteme paralele cât și seriale. VORPAL stochează datele în fișiere HDF5, ceea ce face posibilă vizualizarea rezultatelor cu o serie de pachete de softuri precum OpenDX și IDL de la RSI.

VORPAL oferă modele fizice din gama simulărilor plasmiei, precum: acceleratoare de particule cu pulsuri laser, propulsoare cu plasmă, ghiduri de microunde de putere înaltă și camere de procesare a plasmiei. Modelele de ionizare și gaz neutru permit codului VORPAL să reducă decalajul între fizica plasmiei și a curgerilor neutre.

Softul rulează pe o gama mare de platforme computaționale, de la sisteme desktop la supercomputere puternic paralelizate cu mii de procesoare. Utilizarea formatelor de fișiere standard permite analiza datelor cu pachete de software gratuite.

VORPAL este dezvoltat și comercializat în prezent de *Compania Tech-X* ca parte a pachetului VSim, care este descris în continuare.

1.2 VSim

<http://www.txcorp.com/home/vsim>

VSim este un soft bazat pe metoda PIC, disponibil comercial, fiind dezvoltat și comercializat de *Compania Tech-X*. Acest soft folosește motorul VORPAL. VSim efectuează simulări numerice la scară largă a experimentelor de accelerare laser-plasmă având caracteristici necesare pentru a reprezenta cele mai complexe experimente, și este gata de uz „direct din cutie”. Pachetul VSim pentru accelerarea plasmei conține exemple de fișiere de intrare. VSim modelează precis experimente reale prin realizarea de simulări la scară largă cu zgomot numeric minim.

Asistența pentru clienți este realizată de aceiași fizicieni, matematicieni și ingineri care dezvoltă produsul. Compania producătoare oferă de asemenea posibilitatea stabilirii unui contract de consultanță, care accelerează procesul de instruire a echipei de modelare, și duce la o mai bună colaborare cu echipa producătoare, pentru implementarea de funcții noi necesare pentru problema studiată.

Costurile pachetului, cu reducerea pentru universitate, sunt \$49750/an (€36500/an) pentru infrastructura BlueGene și ~\$3125 (€2300)/an pentru un sistem cu un singur procesor și \$6250 (€4600)/an pentru sisteme cu opt procesoare. Licențele includ o asistență tehnică 18 ore din partea cercetătorilor activi ce lucrează la aspectele computaționale ale accelerării plasmei. VSim furnizează de asemenea și cursuri de pregătire pe subiectul simulărilor PIC și poate dezvolta caracteristici noi pe baza comercială și contractuală.

Un avantaj major al softului este reprezentat de faptul că pune la dispoziție o gamă largă de modele fizice, iar dimensiunile fizice dintr-o simulare pot fi setate înainte de rularea unei simulări nefiind necesară setarea acestora înainte de compilare. Un alt avantaj este faptul ca softul poate fi rulat atât pe sisteme paralelizate cât și seriale. Cu toate acestea, licențele sunt oferite de producător pe procesor pe an și costul acestora este destul de mare. În plus, VSim folosește metoda PIC explicită ceea ce duce la un timp de rulare al simulării crescând.

2. OSIRIS

<https://plasmasim.physics.ucla.edu/codes/osiris>

Pe parcursul ultimilor 10 ani, *Consortiul OSIRIS (UCLA/IST/USC)* a dezvoltat un cod PIC explicit, mulii-dimensional, paralelizat și relativist numit OSIRIS [35] și un set de unelte de diagnosticare și vizualizare sofisticate. Depunerea de sarcină este făcută local, folosind un sistem de conservare de sarcină, poziția particulelor este actualizată folosind metoda Boris, iar paralelizarea este făcută folosind descompunerea domeniului (poate fi făcută în 1D, 2D și 3D) cu MPI (Message Passing Interface). Codul are de asemenea implementată echilibrarea dinamică de sarcină luând în considerare atât

mișcarea particulelor cât și câmpul în care se află acestea. Particule cu forme de ordin înalt cât și condiții de transmitanță pe frontieră sunt implementate. OSIRIS poate fi folosit pentru accelerare de particule din plasmă, aprinderi rapide și studii de șocuri relativiste.

Un avantaj major al OSIRIS îl reprezintă faptul că funcționează bine pe un singur procesor menținând în același timp o eficiență ridicată în paralel, >80% pentru scalare puternică (mărime fixă a problemei) și >95% pentru scalare scăzută (mărime fixă pe procesor) (rapoarte obținute pe supercomputerul Argonne JuGene Intrepid cu 300.000 de procesoare). OSIRIS a demonstrat scalabilitate bună pe o varietate de alte platforme incluzând Franklin la *NERSC*, Atlas la *LLNL*, și DAWSON la *UCLA*. A fost de asemenea modificat pentru a rula eficient pe unități vectoriale. Calculele principale sunt făcute cu o precizie de o zecimală fără a avea o pierdere de precizie, lucru datorat corelării pozițiilor particulelor cu colțul celulei.

Softul OSIRIS este dezvoltat și folosit de grupuri de la „*University of California at Los Angeles*” și „*GoLP/Instituto de Plasmas e Fusão Nuclear, Instituto Superior Técnico, Lisboa*” și nu este disponibil în afara consorțiului OSIRIS, iar formatul datelor de ieșire necesită unelte de vizualizare dedicate.

3. QUICKPIC

<https://plasmasim.physics.ucla.edu/codes/quickpic>

QuickPIC [36] este un cod PIC 3D eficientizat, paralelizat, relativist, dezvoltat de un grup de cercetare de la *UCLA/U. din Maryland/IST/USC* pentru simularea accelerării de particule în urma interacțiunii laser-plasmă. Algoritmul are la bază aproximația cvasi-statică, care separă evoluția temporală a pulsului laser de evoluția plasmei și reduce o soluție 3D a câmpului electromagnetic și a ecuațiilor de mișcare ale particulelor într-o serie de soluții bidimensionale transversale ale câmpului electromagnetic și ale ecuațiilor de mișcare ale particulelor. Pentru pulsul laser conductor, se folosește aproximația centrului de ghidare ponderomotiv. Per total acest algoritm accelerează timpul computațional cu 2 până la 4 ordine de mărime fără o pierdere prea mare a preciziei.

QuickPIC este construit folosind platforma UPIC (mediu unificat pentru construcția rapidă a noilor coduri PIC, dezvoltat de același grup). Modulele de echilibrare de sarcină dinamică și de ionizare a câmpului sunt de asemenea implementate în structura codului, împreună cu un algoritm de pipelining inovativ. Cu pipelining, QuickPIC atinge o scalare bună la peste 10.000 de procesoare. Un alt avantaj este că folosește metoda PIC cvasi-statică, și astfel ajunge la timpi totali ai simulării mult mai mici.

Codul QuickPIC este dezvoltat și folosit de grupuri de cercetare din cadrul „*University of California at Los Angeles*”, „*GoLP/Instituto de Plasmas e Fusão Nuclear, Instituto Superior Técnico, Lisboa*” și „*University of Maryland*” și nu este disponibil comercial în afara consorțiului.

4. VLPL

<http://pukhov.tp1.uni-duesseldorf.de>

Codul VLPL (Virtual Laser Plasma Lab) [37] 3D a fost dezvoltat la „*Max-Planck-Institut für Quantenoptik*” de către A. Pukhov și permite realizarea de modelări numerice ale interacțiilor relativiste laser-plasmă.

VLPL permite realizarea de simulări tridimensionale directe ale experimentelor reale de interacțiune laser-plasmă datorită îmbunătățirilor aduse modelului numeric. Acesta permite obținerea de rezultate bune chiar și pe rețele grobe cu pași mari de timp. Folosind procesare masiv paralelizată codul ajunge la o eficiență de peste 90% în paralel și scalare liniară a performanței cu numărul de procesoare. Noua versiune C++ de VLPL rulează la mai mult de 100 MFLOP pe procesoarele unui supercomputer de tipul Cray-T3E-600.

VLPL este un cod hibrid PIC/fluid, care, față de un cod PIC tradițional, are avantajul că este capabil să simuleze câmpuri de accelerare extrem de lungi ce conțin sute de oscilații ale plasmei fără problemele numerice aferente metodei PIC. Modelul hibrid descrie plasma în două moduri distincte: în primul rând, ca un set de macroparticule PIC pentru părțile care sunt supuse efectelor cinetice. Un al doilea mod, ca un fluid prin soluția numerică a legilor de conservare. Cea din urmă metodă oferă câteva avantaje în detrimentul metodei PIC: este mult mai eficientă, cu zgomot numeric redus și dispersie numerică mai mică.

VLPL este în prezent dezvoltat de grupul de cercetare condus de A. Pukhov la „*Institut für Theoretische Physik I, University of Düsseldorf*” și nu este disponibil comercial.

5. OOPIC

http://ptsq.eqr.msu.edu/pub/codes/xoopic/oopic_manual/xoopic.html

OOPIC [38] este un cod PIC 2D, ce conține solvele electrostatice și electromagnetice. OOPIC modelează sisteme fizice ca: plasmă, fascicule de particule încărcate, câmpuri magnetice și electrice generate extern, gaze neutre de densitate joasă-moderată. Conține de asemenea o varietate mare de condiții pe frontieră.

Codul este oarecum unic în gama codurilor PIC prin faptul că poate simula și ionizarea gazelor neutre de prin impact cu electroni sau efecte de tunelare induse de câmp.

Întru cât OOPIC este un cod obiect-orientat, scris în C++, acesta poate fi modificat și extins foarte ușor de dezvoltatori C++ experimentați. O interfață grafică comodă și intuitivă pentru sisteme de tipul Microsoft Windows, Mac OS X, și Linux este furnizată de către producător, însă are și posibilitatea de a rula simulări din linia de comandă.

OOPIC a fost dezvoltat și comercializat de *Corporația Tech-X*, fiind scos din uz în 2013, însă versiuni gratuite sunt încă disponibile pentru folosire și editare.

6. PICLS

PICLS [39] este un cod PIC 3D relativist, bazat pe o schemă numerică utilizată pe scară largă pentru a studia sistemele cu un număr mare de particule care interacționează cu câmpurile electromagnetice. Acest cod permite modelarea interacțiunii laser-plasmă

pentru intensități ridicate ale laserului și folosind pulsuri laser de durată mică. În cadrul fizicii plasmelor de densitate de energie înaltă (HEDP), transportul de electroni rapizi în plasmă de densitate comparabilă cu a solidelor este o problemă esențială. Modelarea plasmelor cu densitate mare cu ajutorul simulărilor PIC este dificil de realizat din cauza lungimi Debye foarte mică care trebuie rezolvată pentru a evita încălzirea numerică a plasmăi. Diferitele etape de calcul într-un cod PIC sunt următoarele:

- Rezolvarea ecuațiilor de mișcare pentru particule. Aceasta necesită interpolarea câmpului electromagnetic în pozițiile particulelor.
- Acumularea curentului pe rețeaua spațială pe baza pozițiilor și vitezelor particulelor. Această acumulare se realizează utilizând un algoritm care garantează prin construcție că ecuația de continuitate se verifică particulă cu particulă. Această metodă permite evitarea rezolvării ecuației Poisson, a cărei rezolvare este dificil de paralelizat.
- Rezolvarea ecuației Maxwell pe rețeaua spațială folosind o schemă de scindare direcțională.

Un alt avantaj important al PICLS în fața codurilor PIC convenționale îl reprezintă modelarea gradientilor de densitate de plasmă cu ajutorul particulelor care au o pondere variabilă asociată. Păstrând constant raportul sarcină-masă al super-particulelor, densitatea sarcinilor reale pe care le reprezintă poate fi variată. Într-o situație în care densitatea de plasmă variază din regiunea sub-densă, în care pulsul laser este absorbit, la ținta supra-densă, care are de o densitate de 100 de ori mai mare, este nepractică menținerea constantă a densității numărului de macro-particule deoarece alegerea unei rezoluții rezonabile în regiunea sub-densă semnifică un număr enorm de particule în țintă. Acest lucru este evitat în PICLS prin utilizarea de ponderi variabile pentru particule.

Codul poate fi folosit 1D, 2D și 3D, pentru mai bună optimizare a modelelor și permite rularea atât pe sisteme paralelizate cât și seriale, însă formatul datelor de ieșire necesită unelte de vizualizare dedicate.

După ce am evaluat aceste unelte software din mai multe puncte de vedere, am stabilit că codul PIC cel mai adecvat pentru nevoile noastre actuale este instrumentul numeric PICLS. Am ales acest cod din mai multe motive. În primul rând, codul are un fundament teoretic solid în domeniul simulărilor plasmă, iar în trecutul recent a fost optimizat intens pentru simulări numerice ale interacțiunilor laser-plasmă. Codul sursă este în prezent optimizat la *Universitatea din Bordeaux*, și poate fi pus la dispoziția noastră pentru a fi utilizat, editat și posibil optimizat. Un alt motiv important pentru care acest instrument a fost ales este dorința dezvoltatorilor să corespundă cu grupul nostru de cercetare cu scopul de a ne ajuta să dezvoltăm o înțelegere bună în a pune în aplicare codul și a posibilelor domenii de studiu în care poate fi folosit. Luând toate acestea în considerare, am considerat că e de dorit să continuăm procesul nostru de stabilire a unei echipe de simulare numerică a interacțiunilor laser-plasmă având codul PIC PICLS la bază.

Anexa 1: Propuneri TDR

(1) Degradation of optical crystals and solar cells in space

1. Objective

To use ELI facilities for accelerated testing of the degradation of optical crystals and solar cells performance in space-like irradiation conditions. Beyond the scientific experiments, it can be thought as a testing service that ELI can provide to manufactures of space solar cells or optical components designed to be used for satellites.

2. Physical case

Due to the high cost of direct investigations in space, the effects of cosmic radiation on condensed matter can be evaluated with ground based experiments and ELI-NP facility is a very important candidate. Mainly because the high power lasers could be a better alternative for reproducing cosmic ray interaction with condensed matter, since the energy spectrum of laser accelerated particles is similar to the broad, multi-MeV-scale spectra of natural cosmic radiation, as opposed to the quasi-monoenergetic spectrum of particle beams in classical accelerators [1]. In the last years at the West University of Timisoara, the crystal growth group has gained an important experience in the field of growth and characterization of fluoride type crystals doped with rare earth elements [2, 3], while at the PV Laboratory an expertise in the monitoring, estimation and forecasting of PV systems operation has been developed (<http://solar.physcis.uvt.ro>). Therefore, an interesting topic that can be covered is the effect of radiation on solar cells, calcium fluorite and barium fluorite crystals.

Calcium fluoride (CaF_2) has much to offer as an optical material. Besides being highly transparent in the deep UV region, it also has excellent lifetime stability and relatively high damage threshold in the deep UV. Furthermore, CaF_2 has a broad transmission range, from 140 nm to 7.5 μm and beyond, featuring a low refractive index, removing the need for an anti-reflection coating. Therefore, CaF_2 optical windows are ideal for use as spectrophotometer windows. CaF_2 optical lenses are used in many spectroscopy applications used by NASA in CRISM and UCIS devices [4]. Likewise, CaF_2 grating prisms (grisms) have been successfully used in the NICMOS camera on board HST [5]. Barium fluoride crystal finds applications as a transmitting window over a wide wavelength range and as a fast scintillator involving emission at 195 nm and 220 nm, which is fairly temperature independent around 300K [6], used for the detection of X-rays, gamma rays or other high energy particles. As it is one of the fastest scintillators known, it may be employed in outer space radiation detection devices. The damage of BaF_2 is caused by the formation of color centers, which cause a self-absorption of the scintillation light [7]. At the Crystal Growth Laboratory at the West University of Timisoara good optical quality CaF_2 and BaF_2 crystals can be obtained. For this reason, it is important to investigate how cosmic radiation exposure influences the defect structure and optical proprieties of such fluorides, as those employed in the manufacturing of optical components installed in space satellites.

On the other hand, the solar generator is the only spacecraft subsystem where electrically active semiconductor devices are directly exposed to space with a minimum

protection. The most influential aspects of the space environment typically depend on the altitude and inclination of the mission orbit (the main operational position of satellites are the geostationary orbit (GEO—36 000 km) and the low-earth-orbit (LEO—several hundred km altitude with various inclination).

Trapped electrons and protons have the main contribution to the degradation of the solar cells efficiency (see figures 4, 5, 6 from chapter 2.3 *Evaluation of high energy ionizing radiation effects in materials* from the current version of the TDR.). The main parameter in selection a space solar cell is the end-of-life (EOL) power output. A variety of novel devices and materials are under development world-wide: III-V compound solar cells comprising GaAs on Ge mono-, dual- and triple-junction devices (e.g. [8]). The current efficiency of the space solar cells is over 30% on space PV market and over 44% on R&D lab [9]. As example of solar cells degradation in space, the table below shows a comparison for the electrical performance for high efficiency silicon, dual-junction (2J) and triple-junction (3J) commercial space solar cells covered by thin glass film [10].

Solar Cell Technology	Kg/m ²	η (%)		
		BOL	EOL GEO	EOL LEO
High- Efficiency Si	0.23	17.0	12.5	10.6
2J InGaP/GaAs-on-Ge	0.85	23.5	20.0	18.1
3J InGaP/GaAs/Ge-on-Ge	0.85	26.0	22.6	20.3

GEO Conditions (60°C) – 1-MeV, 5E14 e/cm²

LEO Conditions (80°C) – 1-MeV, 1E15 e/cm²

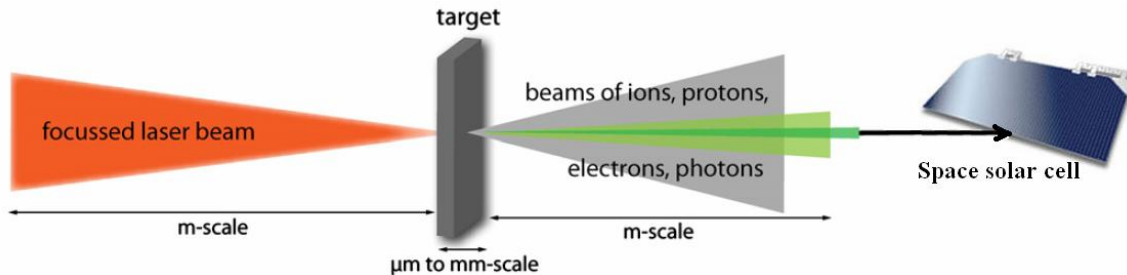
There are two main approaches for evaluating the solar cell degradation in space [11]: (1) US Jet Propulsion Laboratory (JPL). The goal of this approach is the determination of the normal-incidence 1MeV electron fluence which produces the same level of damage to the cell as a specified space radiation environment. (2) US Naval Research Laboratory (NRL) The essence of this approach is the calculation of the displacement damage dose for a given mission using the spectral damage coefficients and the proton and electron spectra incident on the cell.

3. Technical proposal

The radiation occurring in space often has exponential or power-law energy spectra, since the acceleration mechanisms produce distributions that follow statistical laws. They are not easy to reproduce in the environment of standard accelerators, which due to reliance on resonance produce nearly mono-energetic distributions. Such linear accelerators are used in present for testing the solar cells EOL efficiency [1]. At ELI-NP the highest fluence of LPA radiation in the world will be obtained. Therefore, we propose to use ELI-NP facilities for accelerated testing of the degradation of optical crystals and solar cells performance in space-like irradiation conditions

A new alternative is proposed here (see figure below): to use a laser-plasma accelerator in order to emulate the space conditions for accelerated testing of the solar

cells efficiency degradation. Likewise, similar defect structure and optical proprieties modification induced by cosmic radiation in fluoride crystals can be studied in a such a configuration. The effects of irradiation on the luminescence efficiency as well on the other spectral and thermal properties of the fluorides will be investigated.



Basic LPA scheme. A focused high-power laser pulse is incident on matter. Electrons are set into motion by the focused electromagnetic field, which can result either in relativistic pencil-like electron and photon beams propagating in the forward direction (green) with low divergences, and/or in the generation of electrostatic charge separation which in addition to electrons leads to subsequent acceleration of protons and ions with broad-cone emission angles [1]

4. Tasks:

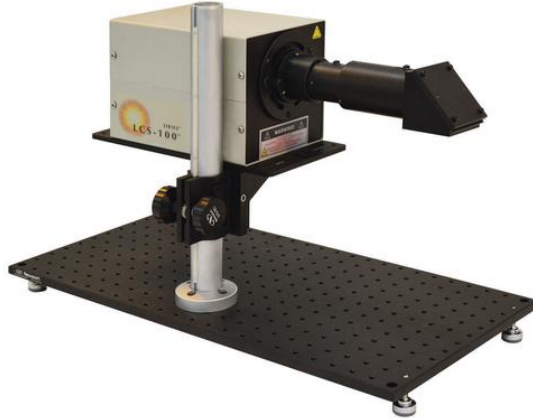
7. To measure the solar cell parameters at BOL (beginning of life)
8. To study the structural defects-dislocations in $(\text{Ba/Ca})\text{F}_2$ crystals before irradiation
9. Absorption/transmission IR-VIS-UV spectroscopy of $(\text{Ba/Ca})\text{F}_2$ crystals before irradiation
10. To expose the solar cells and grown fluoride crystals to an electrons and protons flux generated by LPA – ELI
11. To measure the solar cell parameters at EOL (end of life)
12. To study the structural defects-dislocations in $(\text{Ba/Ca})\text{F}_2$ crystals after irradiation
13. Absorption/transmission IR-VIS-UV spectroscopy of $(\text{Ba/Ca})\text{F}_2$ crystals after irradiation

All electrical parameters of the solar cell should be carried out under AM0 condition.

5. Required equipment at ELI for testing solar cells degradation in space

SOLAR AM0 Simulator (<http://www.newport.com/lcs-100-series-small-area-solar-simulators/1014653/1033/info.aspx>)

LCS-100 Series Solar Simulators are intended for researchers requiring the performance of a certified system over a small area of illumination. These 1.5 x 1.5 inch (38 x 38 mm) Simulators meet Class ABB as defined by the ASTM and IEC standards. They can be equipped with an AM0 filter;



References:

- [1] B. Hidding, T. Königstein, O. Willi, J.B. Rosenzweig, K. Nakajima, and G. Pretzler, Nucl. Instr. Meth. A, 636 (2011) 31
- [2] I. Nicoara et al., J. Cryst. Growth 310, 2008, 1470
- [3] M. Stef, I. Nicoara, F. Stef "Dielectric relaxation in ytterbium- and lead- doped calcium fluoride crystals", European Physical Journal B 86 (2013) art. no. 152
- [4] Byron Van Gorp ; Pantazis Mouroulis ; Diana Blaney ; Robert O. Green ; Bethany L. Ehlmann ; Jose I. Rodriguez, "Ultra-compact imaging spectrometer for remote, in situ, and microscopic planetary mineralogy", J. Appl. Remote Sens. 8(1), 084988 (Apr 25, 2014). doi:10.1117/1.JRS.8.084988
- [5] Jian Ge ; Alexander S. Kuttyrev ; Bruce H. Dean ; Harvey S. Moseley ; Bruce E. Woodgate ; Catherine Marx, "Optical design of rapid infrared-visible multi-object spectrometer: a NGST demonstration instrument", Proc. SPIE 4850, IR Space Telescopes and Instruments, 535 (March 4, 2003); doi:10.1117/12.461948
- [6] H.B. Newman, in: F. De. Notaristefani, P. Lecoq, M. Schneegans (Eds.), Heavy Scintillators for Scientific Industrial Applications, Editions, Frontiers, 1993, p. 5.
- [7] "On quality requirements to the barium fluoride crystals", Ren-yuan Zhu, Lauritsen Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena, , USA, 1993
- [8] Cotal HL, Law DC, Karam NH, Bedair SM (2010) Recent Development in High Efficiency Multijunction Solar Cell Technology. In Physics of Nanostructured Solar Cells (Eds. Badescu V, Paulescu M) Nova Science, New York, pp. 251-270.
- [9] F. Dimroth (2013) World Record Solar Cell with 44.7% Efficiency. Fraunhofer ISE, Press Release 22/13, September 23, 2013. <http://www.ise.fraunhofer.de/en/press-and-media/press-releases/>
- [10] Fatemi NS, Pollard HE, Huo HQ, Sharps PR (2000) Solar arrays trades between very high-efficiency multi-junction and Si space solar cells, In proc. 28th IEEE PVSC September 2000, Anchorage, Alaska.
- [11] Messenger SR, Summers GP, Burke EA, Walters RJ, Xapsos MA (2001) Modeling Solar Cell Degradation in Space: A Comparison of the NRL Displacement Damage Dose and the JPL Equivalent Fluence Approaches Progress in Photovoltaics: Research and Applications 9: 103-121.

*(2) Doped fluoride crystals irradiation for fundamental studies
of optical proprieties modification*

1. Objective

To use of laser plasma accelerated particle radiation from ELI in order to study the change in optical and dielectric properties of irradiated crystalline materials with perspective novel laser applications, in the framework of *task 3. "Fundamental researches in the field area of energetic and multi-component ionising radiation fields effect on condensed matter"* from the current TDR.

2. Physical case

Interest on crystal growth and characterization at the West University of Timișoara, Faculty of Physics began 40 years ago. The *Crystal research laboratory - growth and characterization* is part of the Physics Department of the West University of Timișoara. The main goal has been to design set-ups and elaborate technology to obtain and to characterize the crystals. The participation of the WUT in the ELI collaboration will have a significant impact on the organization research in the field of crystal growth mainly at two levels:

- at the fundamental research level - the studies of material behavior in extreme environments (which is a central topic in the ELI-NP proposed experiments), will give a fundamental understanding of the radiation induced damage in crystals, taking advantage of the specific properties of laser driven radiation production, such as ultrashort time scale when the radiation is generated and the relatively broadband spectrum of radiation, complementary to the traditional nuclear physics research laboratories [1].

- at the applied research level – the experiments performed under high energy irradiation processes could be very helpful to obtain new laser materials for biomedical applications through cristal doping elements charge conversion radiation mechanisms.

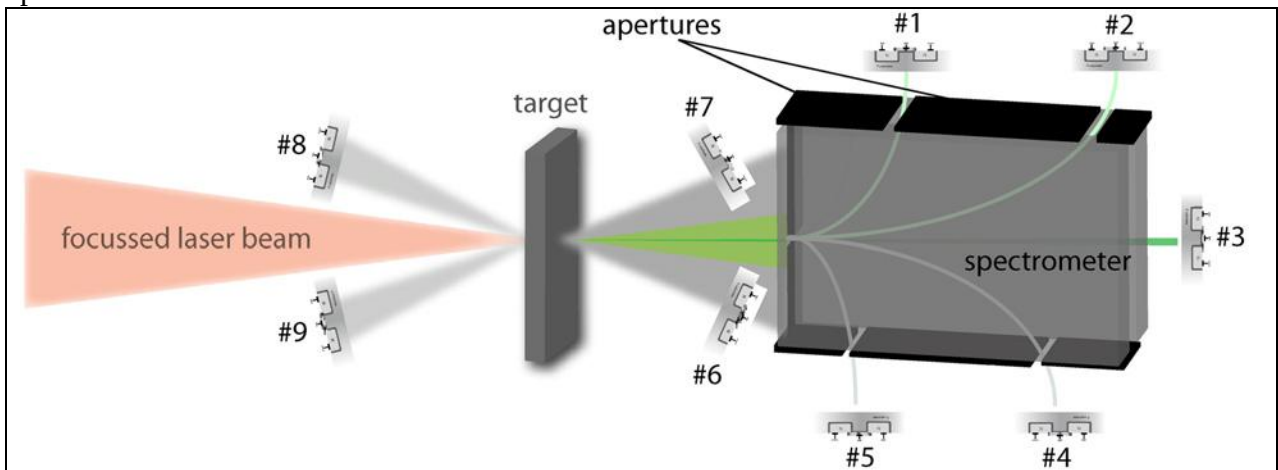
The fluorides type single crystals are an important class of materials in the modern technologies of the solid state laser elaboration and radiation detectors. Rare earth doped CaF_2 and BaF_2 crystals are used as laser active media due to the well known good optical properties of the fluoride host and due to the broadband transition of the different of rare earth ions used as dopants in the crystals. For example, the Er^{3+} ion properties have been intensively studied due to the its strong IR luminescence used for laser resurfacing of human skin [2] and the Yb^{2+} ions luminescence (around 314 nm) can be used in psoriasis phototherapy [3, 4, 5]. By doping CaF_2 and BaF_2 crystalline host with YbF_3 , both Yb^{2+} and Yb^{3+} ions will coexists in the crystal. Yb^{2+} ions are responsible for emission in UV and VIS [6,7] spectral domain and Yb^{3+} ions are responsible for the emission in near IR domain [8,9].

Modification of ionization states of Yb^{3+} ions doped in CaF_2 crystals can take place due to γ ray irradiation [10]. Color center formation takes place after electron irradiation [11]. Also, there exists a possibility that the site symmetry of the rare earth trivalent ions may change through radiation bombardment by electron or protons capture from the incoming radiation, which change the crystalline field around the dopant. Such formed rich multisite structure changes the crystalline field effects on the impurity ions, generating different electronic levels; some of these levels may be metastable and give rise to possibly useful laser applications. The proprieties of rare earth ions doped in CaF_2

and CaBa_2 after irradiation can be studied using optical and dielectric spectroscopy for the fundamental understanding of the defect structure formed after irradiation.

3. Technical proposal

The irradiated induced defect structure depends on the energy of the particle radiation. The possibility to obtain a heterogeneous energy spectra of the electron and proton beams though LPA in a single laser shout is useful for making a fast, cost-effective and simultaneous exposure of different segments of a crystalline probe (or of various probes) at different energies in different positions by using a deflecting magnetic field, as proposed in [1] (see Figure below). An very important aspect of LPA use for radiation induced optical defects in crystals also concerns the availability of an easily tunable and cheep proton source, compared to the high costs involved with classical proton accelerators. Also, charge conversions from Yb^{3+} to Yb^{2+} could be rapidly reached with the high dose per pulse of the LPA radiation obtained at ELI-NP, for the improvement of the UV emission intensity of Yb^{2+} , which can be used in lasers for psoriasis treatment.



LPA multiple, simultaneous component testing scheme. The exponential-energy electrons and protons/ions generated during a laser shot are deflected according to their charge, energy and mass in a magnetic field based on permanent magnets. Multiple measurement ports (e.g., #1 to #9) are possible to test multiple samples during the same shot [1]

4. Tasks:

14. Growth of various rare earth – concentrations doped $(\text{Ba}/\text{Ca})\text{F}_2$ crystals at WUT
15. Absorption/transmission IR-VIS-UV spectroscopy of various concentrations rare earth –doped $(\text{Ba}/\text{Ca})\text{F}_2$ crystals before and after irradiation
16. Dielectric spectra of various concentrations rare earth –doped $(\text{Ba}/\text{Ca})\text{F}_2$ crystals before and after irradiation

[1] B. Hidding, T. Königstein, O. Willi, J.B. Rosenzweig, K. Nakajima, and G. Pretzler, Nucl. Instr. Meth. A, 636 (2011) 31

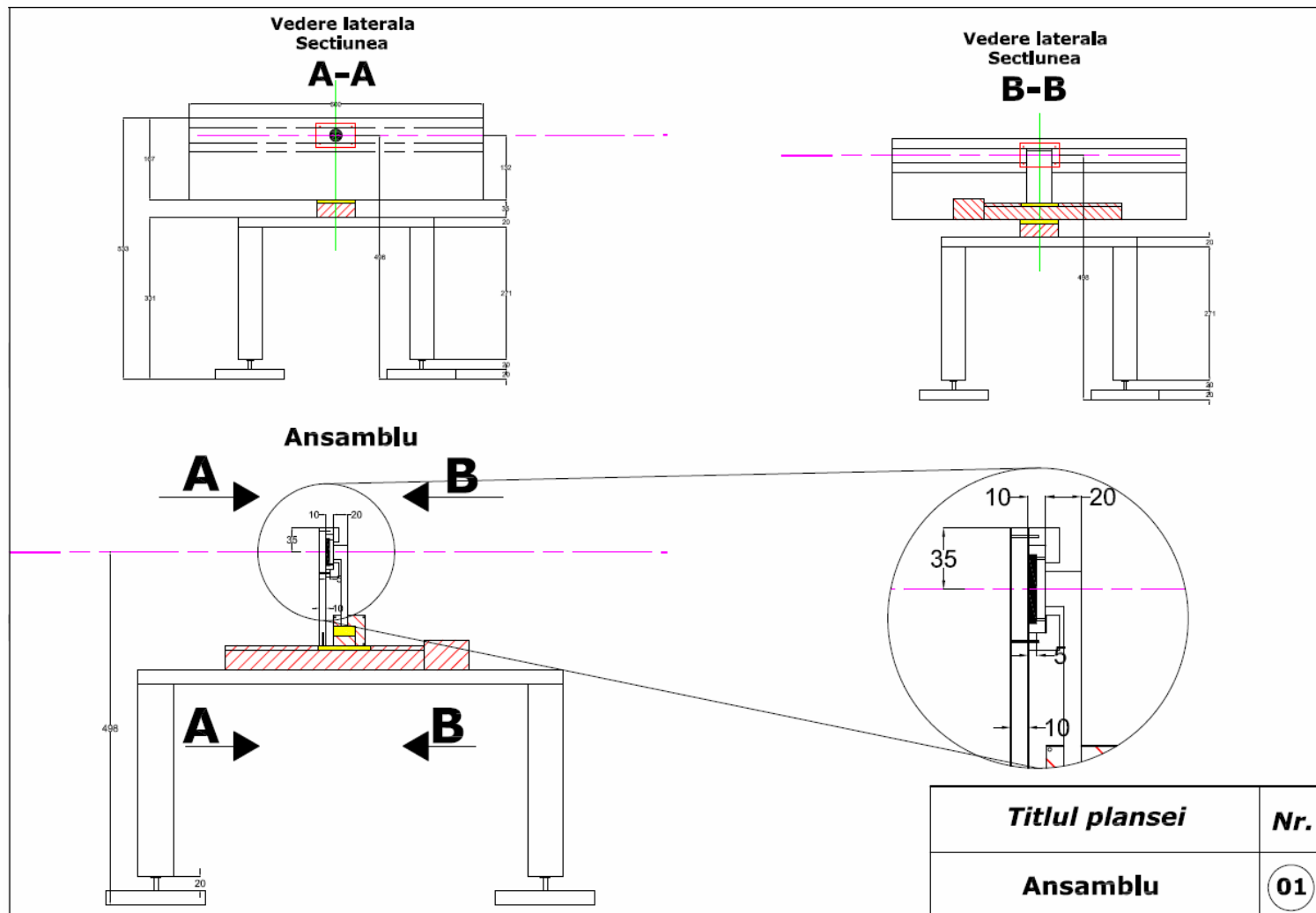
[2] S. Majewski, D. Anderson, Nucl. Instr. and Meth. A241 (1985) 76.

[3] Venkataram Mysore, Indian J. Dermatol. Venereol. Leprol. 75(2009) 119

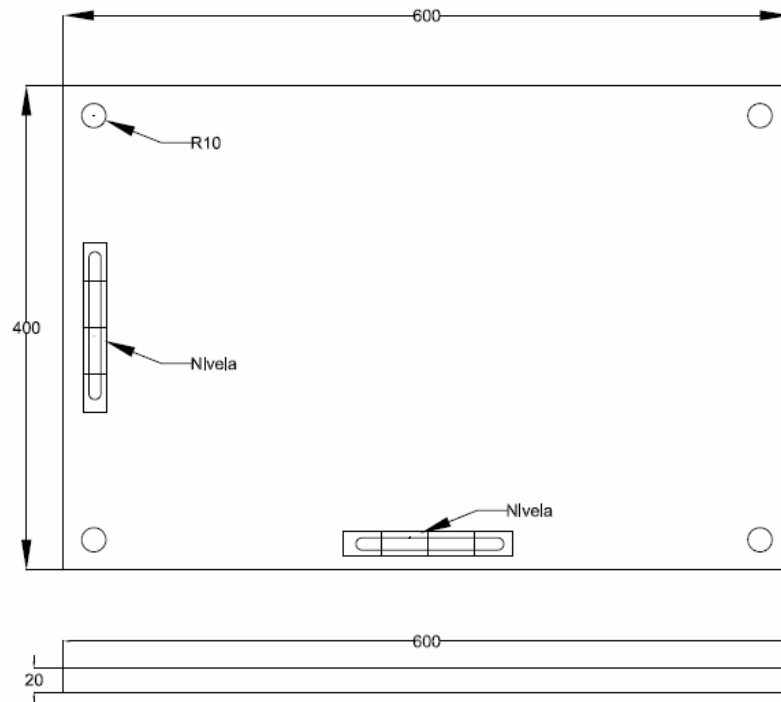
[4] T. Mudigonda et al., J. Am. Acad. Dermatol. 66(2011) 664

- [5] J. M. Carrascosa et al. *Actas Dermosifiliogr.* 103 (2011) 175 [6] J. Rubio, *J. Phys. Chem. Solids* 52 (1991) 101.
- [7] I. Nicoara, L. Lighezan, M. Enculescu, I. Enculescu, *J. Cryst. Growth* 310, 2026 (2007)
- [8] V. Petit, P. Camy, J.L. Doualan, and R. Moncorgé, *Appl. Phys. Lett.* 88, 051111 (2006).
- [9] J. L. Doualan et al. *Laser Physics* 20, 533 (2010).
- [10] S.M. Kaczmarek et. al., *J. Phys.: Condens. Matter* 17 (2005) 3771–3786
- [11] W.J. Scouler, A. Smakula, Coloration of pure and doped Calcium Fluoride crystals at 20 C and -190 C, *Phys Rev* 120, 1154-1161 (1960)

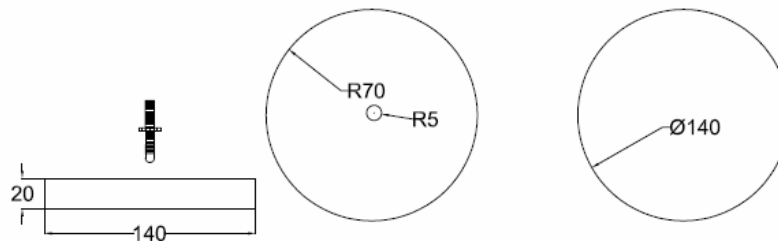
Anexa 2:



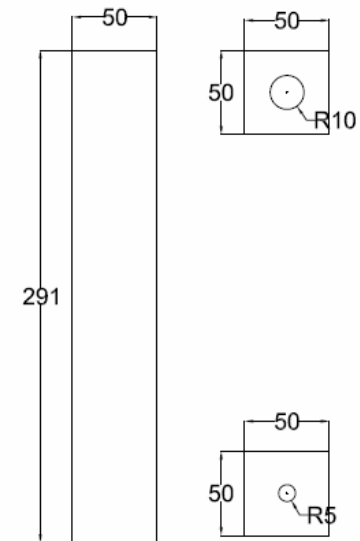
Blatul de masa



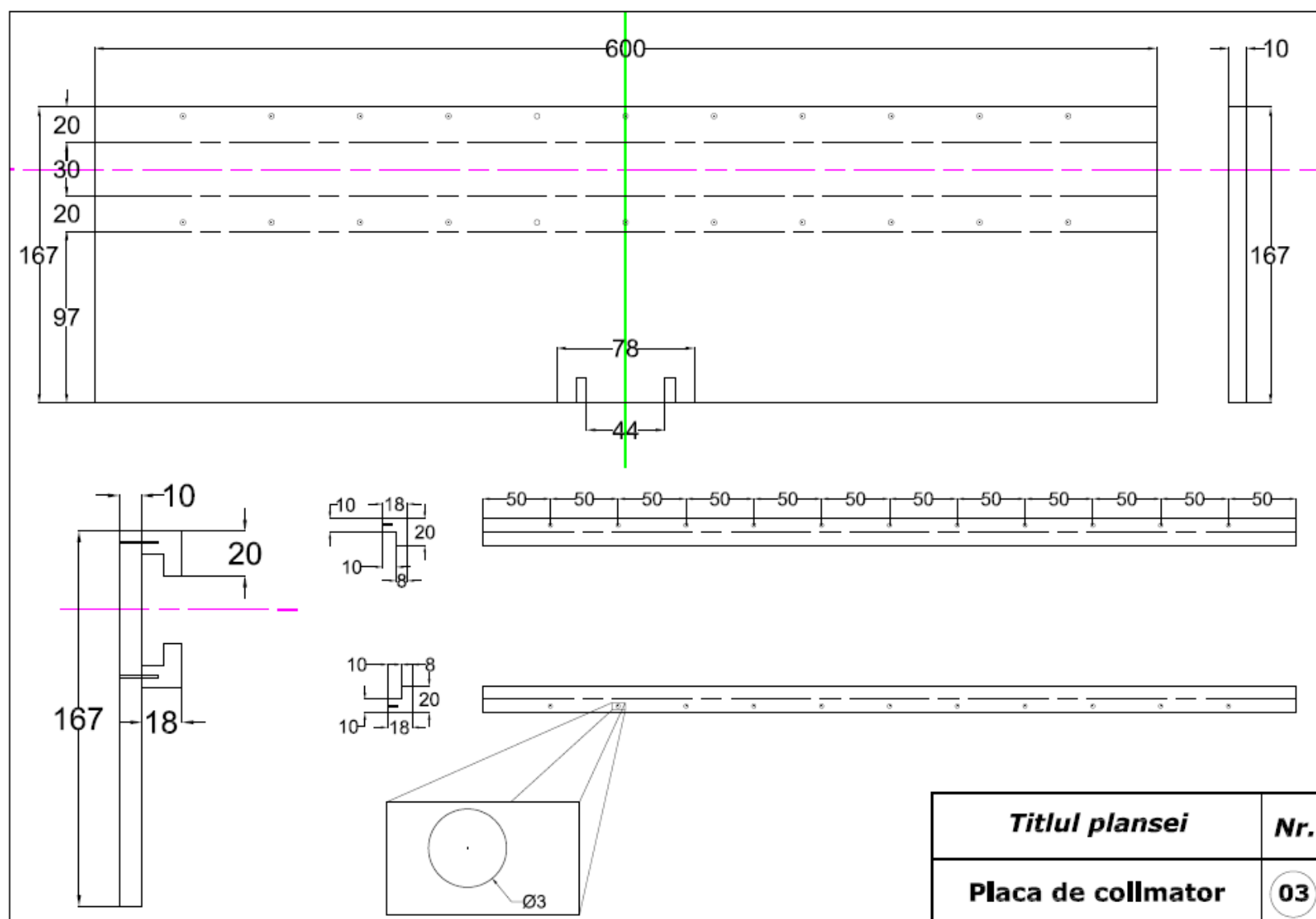
Talpa piciorului

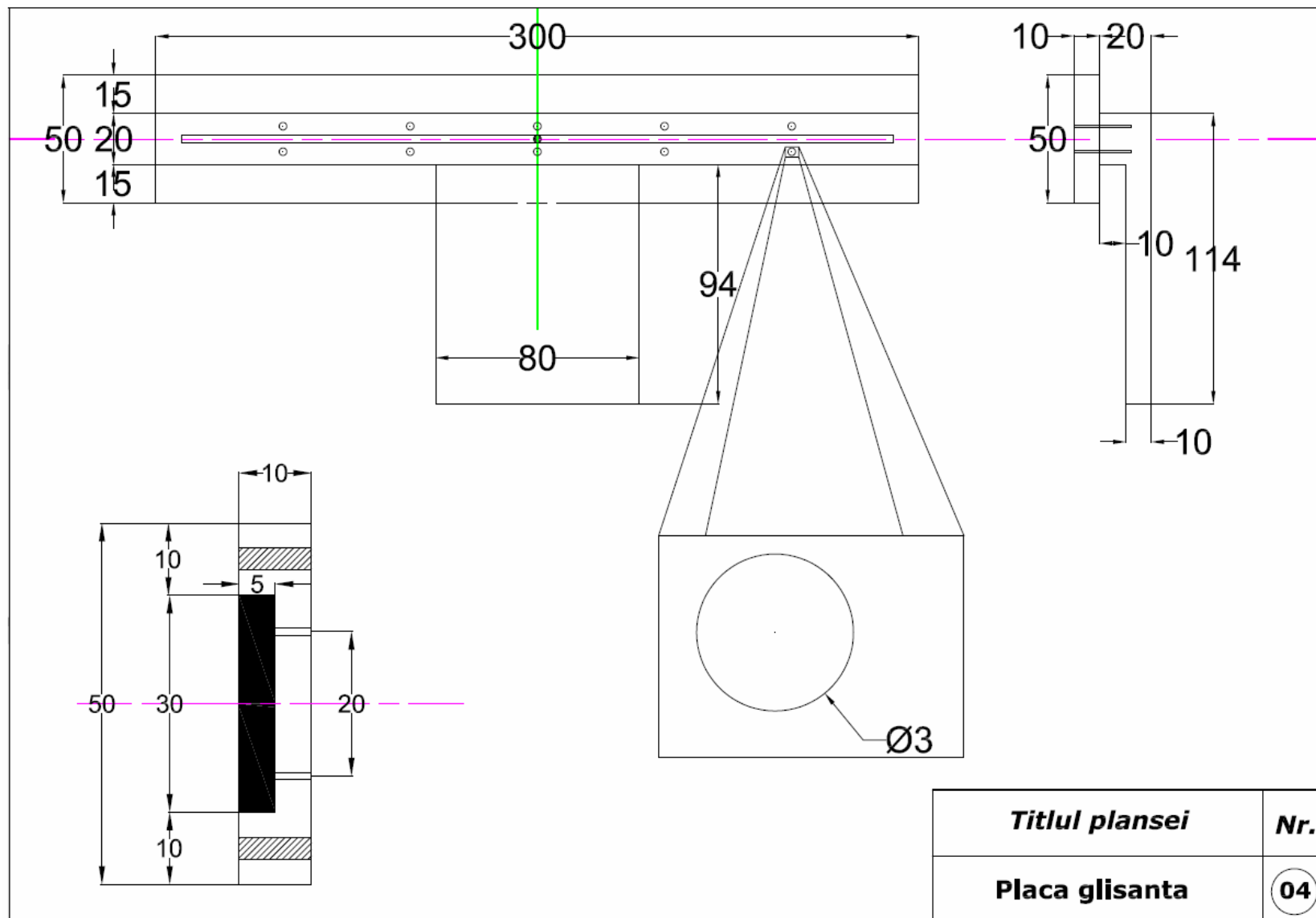


Piciorul mesei

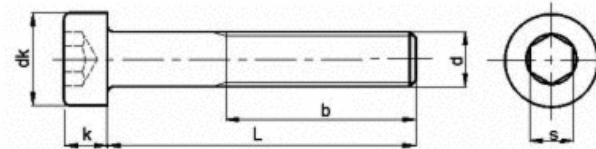


<i>Titlul plansei</i>	<i>Nr.</i>
Masa suport	02





Hexagonal Socket Head Cap Screws



DIN 912
ISO 4762

Class: 8.8/10.9/12.9

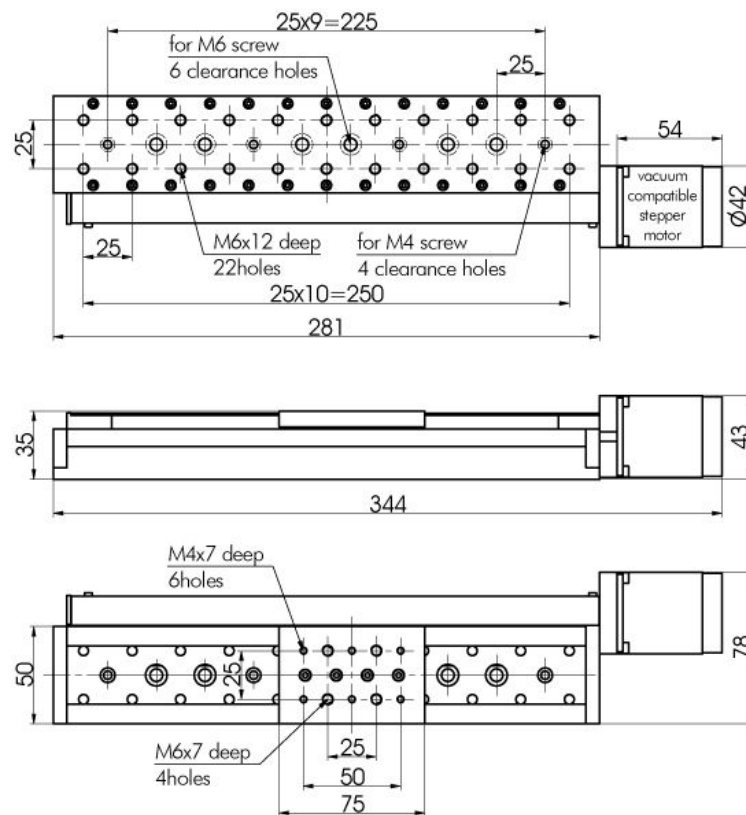
d	M3	M4	M5	M6	M8	M10	M12	M14	M16	M18	M20	M22	M24	M27	M30	M33	M36	M42	M48
dk	5.5	7	8.5	10	13	16	18	21	24	27	30	33	36	40	45	50	54	63	72
k	3	4	5	6	8	10	12	14	16	18	20	22	24	27	30	33	36	42	48
s	2.5	3	4	5	6	8	10	12	14	14	17	17	19	19	22	24	27	32	36
L [mm]																			
6	•																		
8	•	•	•																
10	•	•	•	•	•														
12	•	•	•	•	•	•													
16	•	•	•	•	•	•	•												
18	•	•	•	•	•	•	•												
20	•	•	•	•	•	•	•	•											
22	•	•	•	•	•	•	•	•											
25	•	•	•	•	•	•	•	•	•										
30	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•									
35		•	•	•	•	•	•	•	•	•	•								
40		•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•						
45			•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•						
50			•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•						
55				•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•					
60				•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	



Manufacturer of Opto-Mechanical equipment for research, industry and education

P.O. Box 377
03012 Vilnius, Lithuania
Phone: +370-5-265 1474
Fax: +370-5-265 1463
E-mail: sales@standa.lt
http://www.standa.lt

Medium Width Motorized Translation Stage 8MT175V-200-VSS42
with Vacuum compatible stepper motor



Concluzii

Obiectivele propuse în această fază au fost îndeplinite:

- A1.1 Au fost propuse două experimente de iradiere a materiei condensate pentru Memoriul Tehnic (Technical Design Report) al ELI-NP. Ambele propuneri sunt inserate în Anexa 1.
- A1.2 A fost proiectat standul experimental pentru iradierea materialelor cu particule accelerate cu laserul folosind infrastructura CETAL. Plasele de execuție sunt prezentate în Anexa 2, iar fișierul .dwg este anexat la prezentul raport.
- A2.1 Au fost desfășurate 9 experimente de creștere a cristalelor de fluorură de bariu dopate cu yterbiu folosind metoda Bridgman. Au fost identificate condițiile optime de creștere (descrise în detaliu în raport) și au fost crescute cristalele din care prin clivare s-au obținut probele pentru etapa următoare (experimentare pe platforma CETAL).
- A2.2 Au fost crescute cinci cristale de fluorură de calciu dopate cu yterbiu utilizând metoda Bridgman din care prin clivare s-au obținut probele pentru etapa următoare.
- A4.1 În urma evaluării câtorva instrumente software (Vsim, OSIRIS, QUICKPIC, VLPL, OOPIC, PICLS) s-a ajuns la concluzia că cel mai bun cod numeric de tip PIC pentru modelarea numerică a accelerării particulelor în urma interacțiunii laser-țintă subțire este software-ul PICLS. Software-ul PICLS a fost compilat pe supercomputerul BlueGene de la Centrul HPC de la Universitatea de Vest din Timișoara.

Bibliografie

- [1] B. Hidding, T. Königstein, O. Willi, J.B. Rosenzweig, K. Nakajima, and G. Pretzler, Nucl. Instr. Meth. A, 636 (2011) 31.
- [2] I. Nicoara et al., J. Cryst. Growth 310, 2008, 1470
- [3] M. Stef, I. Nicoara, F. Stef "Dielectric relaxation in ytterbium- and lead- doped calcium fluoride crystals", European Physical Journal B 86 (2013) art. no. 152
- [4] Byron Van Gorp ; Pantazis Mouroulis ; Diana Blaney ; Robert O. Green ; Bethany L. Ehlmann ; Jose I. Rodriguez, "Ultra-compact imaging spectrometer for remote, in situ, and microscopic planetary mineralogy", J. Appl. Remote Sens. 8(1), 084988 (Apr 25, 2014). doi:10.1117/1.JRS.8.084988
- [5] Jian Ge, Alexander S. Kuttyrev, Bruce H. Dean, Harvey S. Moseley, Bruce E. Woodgate, Catherine Marx, "Optical design of rapid infrared-visible multi-object spectrometer: a NGST demonstration instrument", Proc. SPIE 4850, IR Space Telescopes and Instruments, 535 (March 4, 2003); doi:10.1117/12.461948
- [6] H.B. Newman, in: F. De. Notaristefani, P. Lecoq, M. Schneegans (Eds.), Heavy Scintillators for Scientific Industrial Applications, Editions, Frontiers, 1993, p. 5.
- [7] Ren-yuan Zhu, "On quality requirements to the barium fluoride crystals", Lauritsen Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena, , USA, 1993
- [8] Cotal HL, Law DC, Karam NH, Bedair SM (2010) Recent Development in High Efficiency Multijunction Solar Cell Technology. In Physics of Nanostructured Solar Cells (Eds. Badescu V, Paulescu M) Nova Science, New York, pp. 251-270.

- [9] F. Dimroth (2013) World Record Solar Cell with 44.7% Efficiency. Fraunhofer ISE, Press Release 22/13, September 23, 2013. <http://www.ise.fraunhofer.de/en/press-and-media/press-releases/>
- [10] Fatermi NS, Pollard HE, Huo HQ, Sharps PR (2000) Solar arrays trades between very high-efficiency multi-junction and Si space solar cells, In proc. 28th IEEE PVSC September 2000, Anchorage, Alaska.
- [11] Messenger SR, Summers GP, Burke EA, Walters RJ, Xapsos MA (2001) Modeling Solar Cell Degradation in Space: A Comparison of the NRL Displacement Damage Dose and the JPL Equivalent Fluence Approaches Progress in Photovoltaics: Research and Applications 9: 103-121.
- [12] B. Hidding, T. Königstein, O. Willi, J.B. Rosenzweig, K. Nakajima, and G. Pretzler, Nucl. Instr. Meth. A, 636 (2011) 31
- [13] S. Majewski, D. Anderson, Nucl. Instr. and Meth. A241 (1985) 76.
- [14] Venkataram Mysore, Indian J. Dermatol. Venereol. Leprol. 75(2009) 119
- [15] T. Mudigonda et al. J. Am. Acad. Dermatol. 66(2011) 664
- [16] J. M. Carrascosa et al. Actas Dermosifiliogr. 103 (2011) 175
- [17] J. Rubio, J. Phys. Chem. Solids 52 (1991) 101.
- [18] I. Nicoara, L. Lighezan, M. Enculescu, I. Enculescu, J. Cryst. Growth 310, 2026 (2007)
- [19] V. Petit, P. Camy, J.L. Doualan, and R. Moncorgé, Appl. Phys. Lett. 88, 051111 (2006).
- [20] J. L. Doualan et al. Laser Physics 20, 533 (2010).
- [21] S.M. Kaczmarek et. al., J. Phys.: Condens. Matter 17 (2005) 3771–3786
- [22] W.J. Scouler, A. Smakula, Coloration of pure and doped Calcium Fluoride crystals at 20 C and -190 C, Phys Rev 120, 1154-1161 (1960)
- [23] Bridgman P.W., Proc.Am.Acad.Arts Sci. **60** (1925) 305
- [24] Stockbarger D.C., Rev. Sci. Instr. **7** (1938) 133
- [25] Stockbarger D.C., J. Opt. Soc. Am. 39 (1949) 731
- [26] Nicoara I., Nicoara D., *Brevet de invenție Nr. 62842*, (1972)
- [27] Nicoara D., Nicoara I., Schlett Z., *Brevet de invenție Nr. 85993*, (1985)
- [28] Nicoara D. Nicoara I., *Mat. Sci. and Eng.* A102, L1, (1988)
- [29] F. H. Harlow, "A Machine Calculation Method for Hydrodynamic Problems", Los Alamos Scientific Laboratory report LAMS-1956, (1955).
- [30] J. M. Dawson, *Reviews of Modern Physics*, 55 (2), 403-447 (1983).
- [31] A. A. Vlasov, J. Exp. Theor. Phys. 8 (3), 291 (1938).
- [32] A. Macchi, *A Superintense Laser-Plasma Interaction Theory Primer*, Springer (2013).
- [33] C.K. Birdsall, and A.B. Langdon, *Plasma physics via computer simulation*, Taylor & Francis (1985).
- [34] C. Nieter, and J. R. Cary, J. Comp. Phys. 196, 448–472 (2004).
- [35] R. A. Hemker, et al., *Lecture Notes in Computational Science* 2331, 342–351 (2002).
- [36] C. K. Huang, et al., J. Comp. Phys. 217, 658–679 (2006).
- [37] A. Pukhov, J. Plasma Phys., 61 (3), 425–433 (1999).
- [38] J. Verboncoeur, *Comput. Phys. Commun.*, 87 (1–2), 199–211 (1995).
- [39] Y. Sentoku and A. Kemp, J. Comput. Phys. 227, 6846 (2008).